

АКАДЕМИЯ НАУК РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ
ИМЕНИ А. В. РЖАНОВА

на правах рукописи

БЛОШКИН Алексей Александрович

**Электронная структура напряженных
гетероструктур Ge/Si
с вертикально совмещенными квантовыми точками
Ge**

специальность: 01.04.10 — физика полупроводников

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: доктор физико-математических
наук, Якимов А.И.

Новосибирск—2011

Список терминов и сокращений

ИК – инфракрасный

КТ – квантовая точка

СТМ – сканирующая туннельная микроскопия

DLTS – deep level transient spectroscopy (емкостная спектроскопия глубоких уровней)

МС – монослой

E_{QC} – корреляционная энергия дырок

VFF - valance force field (модель поля валентных сил)

Координатные оси x, y, z выбраны в направлениях $\langle 100 \rangle$, причем ось z совпадает с вертикальной осью симметрии пирамиды Ge (направление роста); а оси x, y лежат в плоскости пирамиды Ge. Индексы i, j, k нумеруют узлы (атомы) кристаллической решетки (в главах 1, 2), номера энергетических уровней (в главах 3,4). Индексы $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ - тензорные индексы, пробегающие значения x, y, z . По повторяющимся тензорным индексам подразумевается суммирование

Обозначения для векторов: \mathbf{a} или a_α

Обозначения для тензоров 2-го ранга: $A_{\alpha\beta}$

Операторы обозначаются шляпками: \hat{A}

Для обозначения состояний применяются бра- и кет- символы $|\psi\rangle$, $\langle\psi|$

d_{ij} - длина ненапряженной связи в потенциале Киттинга

α_{ij}, β_{ij} – константы потенциала Киттинга

$\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера (1 для $\alpha = \beta$, 0 для $\alpha \neq \beta$)

\mathbf{r} – радиус-вектор

$\varepsilon_{\alpha\beta}$ – тензор деформации

\hat{H} – гамильтониан

ψ – волновая функция

F – свободная энергия упругой деформации

E_{el} – модуль Юнга

σ – коэффициент Пуассона

m_x^*, m_y^*, m_z^* – эффективные массы электрона в направлениях x , y и z

$U_{el}(\mathbf{r})$ – изменение потенциальной энергии электрона под влиянием деформаций

$\varepsilon(\mathbf{r})$ – след тензора деформации ($\varepsilon_{xx}(\mathbf{r}) + \varepsilon_{yy}(\mathbf{r}) + \varepsilon_{zz}(\mathbf{r})$)

$U_e(\mathbf{r})$ – потенциальная энергия электрона

ΔE_C^{GeSi} – разрыв зоны проводимости на гетерогранице Ge/Si

$x(\mathbf{r})$ – функция состава среды в точке с радиус вектором (r) (0 для Si, 1 для Ge)

Ξ_d, Ξ_u – константы деформационного потенциала для Δ -долины зоны проводимости

a_v, b_v, d – константы деформационного потенциала валентной зоны

L, M, N – величины, характеризующие закон дисперсии в Γ -точке зоны Бриллюэна

ΔE_V^{GeSi} – разрыв валентной зоны на гетерогранице Ge/Si

Δ_0 – величина спин-орбитально расщепления валентной зоны

$\hat{\sigma}(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ – матрицы Паули

$\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ – матрицы, образующие трехмерное представление группы вращений

E_i – энергия i -го уровня электрона или дырки

$\psi_{i\sigma}^\dagger, \psi_{i\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения дырки на уровне i с псевдоспином σ

Γ_{kl}^{ij} – параметры метода конфигурационного взаимодействия

ϵ – диэлектрическая проницаемость

σ_g, σ_u – связывающая и антисвязывающая дырочная орбиталь

J – полный момент дырки

ϕ_η – волновая функция дырки в базисе локализованных орбиталей

e_η – энергия дырки, локализованной на одной из квантовых точек

$U_{\eta i}$ – матрица унитарного преобразования от базиса молекулярных орбиталей к базису орбиталей, локализованных на точках/

$e_n(T)$ – темп термической эмиссии электронов из уровней, локализованных на квантовых точках в зону проводимости Si

g_t – фактор вырождения

σ_n – эффективное сечение захвата электронов в КТ

$\langle v_{th} \rangle$ – средняя тепловая скорость электронов

N_c – эффективная плотность состояний в зоне проводимости Si

E_i – уровень энергии электрона в КТ Ge, отсчитанный от дна зоны проводимости Si

k_B – постоянная Больцмана

T – температура

ω – круговая частота прикладываемого сигнала

G – проводимость

c – состав Ge в нанокластерах

a – постоянная решетки Si

l – латеральный размер нанокластера

h – высота нанокластера

Δ_2 – две Δ -долины в кремнии, ориентированные вдоль оси z

E_g^{Si} – ширина запрещенной зоны Si

E_g^{GeSi} – ширина запрещенной зоны твердого раствора Ge_cSi_{1-c}

$\hat{p}_z, \hat{p}_z, \hat{p}_z$ – операторы импульса

m_{xy}^* – продольная эффективная масса электрона в Δ -долине

C – емкость структуры

U_b – напряжение, приложенное к структуре

E_d – энергия активации примеси

E_{qd} – энергия активации темпа эмиссии электронов

E_{gu} – средняя энергия связи дырки между связывающим и антисвязывающим состояниями

ε_h – гидростатическая деформация

ε_b – двуосная деформация

$\Delta E_{hh}, \Delta E_{lh}, \Delta E_{SO}$ – смещение подзон тяжелых дырок, легких дырок, а так же подзоны, отщепленной спин-орбитальным взаимодействием под влиянием двуосной деформации

E_0 – энергия в одиночной потенциальной яме

Δ_T – интеграл перекрытия

σ_g, σ_u – связывающее и антисвязывающее состояние дырки

Δ_{gu} – расщепление между связывающим и антисвязывающим состоянием дырки

d – расстоянием между квантовыми точками

d_c – расстояние между квантовыми точками, при котором происходит смена симметрии основного состояния

HH – подзона тяжелых дырок

LH – подзона лёгких дырок

SO – подзона, отщепленная спин-орбитальным взаимодействием

\mathbf{L} – орбитальный момент дырки

\mathbf{S} – спин дырки

\mathbf{J} – полный момент дырки

$|J; J_z\rangle$ – состояние с полным моментом J и его проекцией на ось z - J_z

$^1\Sigma_g^{(a)}$ – основное состояние двух дырок – синглет

$^3\Sigma_u$ – первое возбужденной состояние двух дырок – триплет

J_{ST} – расщепление синглет-триплет

$V_{\alpha\beta}, K_{\alpha\beta}$ – интегралы кулоновского и обменного взаимодействия дырок, локализованных в состояниях σ_α и σ_β

δ – расщепление между уровнями дырок, локализованных на верхней и нижней квантовых точках

$\rho(r_0, r)$ – парная корреляционная функция для двух дырок

P_{TT}, P_{BB} – вероятности заполнения двумя дырками верхней и нижней квантовых точек

P_{tot} – полная вероятность двойного заполнения

R – сила осциллятора межзонного перехода

\mathbf{e} – вектор поляризации света

\hat{p} – оператор импульса

u_c, u_v – блоховские функции электрона в зоне проводимости и дырки в валентной зоне

ψ_e, ψ_h – огибающие волновые функции электрона и дырки

e_0, e_1 – основное и первое возбужденное состояние электрона в составе экситона

$I(E)$ – интенсивность межзонного перехода

$S(E - E_i)$ – функция Лорентца для экситонного перехода с энергией E_i

Оглавление

Введение	11
1 Литературный обзор	18
1.1 Понятие о квантовых точках	18
1.2 Гетероструктуры Ge/Si с квантовыми точками Ge	23
1.2.1 Электрические свойства	25
1.2.2 Оптические явления в структурах Ge/Si с квантовыми точками	28
1.2.3 Распределение упругой деформации в Ge/Si квантовых точках	30
1.2.4 Электронная структура	33
2 Методика расчета и эксперимента	42
2.1 Расчет неоднородного распределения упругих деформаций	42
2.2 Расчет электронной структуры	45
2.2.1 Одночастичные состояния электронов и дырок . .	45
2.2.2 Многочастичные состояния дырок	52
2.3 Метод спектроскопии адмитанса	55
3 Электронные состояния в многослойных гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками	60
3.1 Локализация электронов в гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками Ge	60
3.1.1 Расчет деформаций	60

3.1.2	Профиль дна зоны проводимости	65
3.1.3	Энергии и волновые функций связанных электронных состояний	69
3.2	Спектроскопия адмитанса диодов Шоттки со встроенными слоями квантовых точек Ge	72
Выводы к главе 3		87
4	Энергетический спектр и дырочные состояния в двойных вертикально-связанных квантовых точках Ge/Si	88
4.1	Одночастичные дырочные состояния	88
4.1.1	Выбор модели	88
4.1.2	Энергетический спектр дырок в двойных квантовых точках	95
4.2	Двухчастичные дырочные состояния в двойных квантовых точках	111
4.2.1	Энергетический спектр и волновые функции двух дырок, локализованных в двойных квантовых точках	111
4.2.2	Вероятность двойного заполнения	128
Выводы к главе 4		133
5	Экситоны в двойных квантовых точках Ge/Si	135
5.1	Моделирование экситонов в двойных квантовых точках .	135
5.2	Пространственная структура экситонов	140
Выводы к главе 5		146
Выводы		147
Публикации по теме диссертации		150

Введение

Квантовые точки являются перспективным кандидатом для использования в активной области различных приборах полупроводниковых приборах. Успехи в области гетероэпитаксии позволили формировать массивы квантовых точек высокой плотности ($\sim 10^{11} \text{ см}^{-2}$) с островками малых размеров ($\sim 10 \text{ нм}$). В таких островках энергия размерного квантования может существенно превышать тепловую энергию при комнатной температуре, что позволяет использовать приборы, в рабочей области которых находятся массивы квантовых точек, без дополнительного охлаждения. Основной движущей силой формирования столь плотных массивов нанокристаллов является неоднородное распределение упругих деформаций, возникающее из-за рассогласования постоянных решетки материалов гетеропары. При выращивании многослойных гетероструктур с самоорганизующимися квантовыми точками происходит проникновение деформации от нижнего слоя квантовых точек в тонкий слой материала окружающей матрицы и формируют места для зарождения нанокластеров на следующем слое. В результате получают колонны из нанокластеров, упорядоченных в вертикальном направлении. Таким образом, неоднородное распределение упругих деформаций является ключевой особенностью гетероструктур с вертикально совмещенными квантовыми точками.

Судя по количеству публикаций, среди гетеросистем с самоформирующимися массивами островков наиболее изучены системы InAs на подложке GaAs и Ge на подложке Si. Особый интерес к нанокластерам Ge в матрице Si связан с совместимостью метода формирования нанокристаллов с кремниевой технологией. В настоящее время ведутся работы по изготовлению транзисторов и фотоприемников, со встроенным в активную область слоями квантовых точек.

В гетероструктурах Ge/Si(001), полученных в результате роста упруго напряженных гетеросистем, граница Ge/Si является гетероперехо-

дом 2-го типа [1, 2]. Разрывы зон валентной и проводимости на гетерограницах здесь имеют одинаковый знак, в результате чего дырки локализируются в нанокластерах Ge, а электроны находятся в делокализованных состояниях зоны проводимости Si. Упругие деформации возникающие при формировании вертикально совмещенных квантовых точек могут существенно модифицировать зонную структуру валентной зоны и зоны проводимости. Так в работе [3] с помощью локальной сканирующей туннельной микроскопии было обнаружено, что в прилегающем к вершинам островков Ge слое Si ширина запрещенной зоны на 0.16 эВ меньше ее объемного значения. Численное моделирование распределения напряжений в такой системе показывает, что максимальная деформация в Si достигается именно в окрестности вершины островков Ge и представляет собой сжатие в направлении роста [001] (ось z) и растяжение в плоскости структуры [4]. Такая деформация приводит к расщеплению Δ -минимумов зоны проводимости Si, в результате которого низшими минимумами в деформированном Si оказываются две из шести Δ -долин (назовем их Δ_2 -долинами), расположенные на оси z в зоне Бриллюэна. Поскольку напряжения в Si спадают по мере удаления от слоя Ge, то в Si вблизи вершин германиевых нанокластеров должны существовать трехмерные треугольные потенциальные ямы для электронов, в которых могут находиться связанные электронные состояния. Для одного слоя КТ такие потенциальные ямы являются мелкими, а энергия связи электрона в них по оценкам, сделанным в работе [5], составляет всего несколько мэВ. Однако в многослойных структурах Ge/Si с вертикально совмещенным расположением островков Ge дальнедействующие поля упругих напряжений над нанокластерами Ge будут накапливаться в направлении роста, и глубина потенциальной ямы для электронов в зоне проводимости Si увеличится. Как следствие размерного ограничения, в такой потенциальной яме должны существовать локализованные электрон-

ные состояния с энергией связи электрона, заметно превышающей тепловую энергию при комнатной температуре (26 мэВ).

Группы туннельно связанных квантовых точек (КТ) рассматриваются в настоящее время в качестве элементарных блоков при строительстве архитектуры квантовых вычислений. Для реализации квантового бита информации (кубита) предлагается использовать либо спиновую [6] либо зарядовую [7–9] степени свободы, а в качестве носителей информации — электроны, дырки, или экситоны. Считается, что спиновое состояние электрона наиболее предпочтительно для кодирования информации, поскольку время когерентности для спиновых состояний гораздо больше, чем для зарядовых [10,11], при этом оно менее чувствительно к флуктуациям электрических полей в системе.

К моменту начала выполнения работы был накоплен обширный теоретический и экспериментальный материал по электрическим и оптическим свойствам одиночных слоев квантовых точек, выращенных по механизму Странского-Крастанова. Однако к моменту начала работы в литературе отсутствовали данные по электронной структуре многослойных гетероструктур с вертикально совмещенными квантовыми точками. Отсутствие таких данных затрудняет эффективное построение приборов на основе гетероструктур Ge/Si с вертикально совмещенными квантовыми точками Ge.

Целью данной работы являлось построение электронной структуры многослойных напряженных гетероструктур Ge/Si с квантовыми точками II-го типа на основе экспериментальных методов и методов математического моделирования.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- Выявить условий существования локализованных электронных состояний в многослойных гетероструктурах Ge/Si. Определить энергии локализации электронов в отщепленных 2-х Δ -долинах в зоне проводимости Si в зависимости от состава нанокластеров

Ge методами компьютерного моделирования в приближении эффективной массы и экспериментально с помощью спектроскопии комплексной проводимости.

- С помощью 6-ти зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ метода определить электронную конфигурацию волновых функций дырок в сдвоенных квантовых точках Ge/Si в зависимости от размера квантовых точек и расстояния между ними.
- С помощью метода конфигурационного взаимодействия исследовать электронную структуру пары дырок, локализованных в двойных квантовых точках, при различных размерах квантовых точек и расстоянии между ними.
- Определить силу осциллятора межзонного перехода в сдвоенных квантовых точках Ge/Si в зависимости от размера квантовых точек и расстояния между ними.

Научная новизна полученных результатов состоит в следующем:

- Определен энергетический спектр электронов и пространственная конфигурация электронных состояний в гетероструктурах Ge/Si с вертикально совмещенными нанокластерами Ge. Показано, что контроль за упругими деформациями в многослойных гетероструктурах Ge/Si позволяет формировать связанные электронные состояния в Si с энергией связи до 100 мэВ
- Экспериментально исследован отклик комплексной проводимости кремниевых диодов Шоттки со встроенными в базовую область 4 слоями квантовых точек Ge на внешнее переменное электрическое поле, обусловленный эмиссией электронов из связанных состояний в отщепленных деформацией дельта-долинах Si вблизи нанокластеров Ge в делокализованные состояния зоны проводимости ненапряженного Si. Для структур с составом Ge в на-

нонкластерах $s=0.7$ экспериментально определена энергия связи электронов, равная 50 мэВ.

- Определен энергетический спектр дырок и пространственная конфигурация дырочных состояний в гетероструктурах Ge/Si, состоящих из двух вертикально совмещенных квантовых точек Ge, для различных размеров квантовых точек и расстояний между ними. Показано, что при малых расстояниях между квантовыми точками (3.5–4.5 нм в зависимости от размера квантовой точки) интеграл перекрытия уровней, принадлежащих отдельным квантовым точкам превышает разброс между этими уровнями, что приводит к формированию связывающей и антисвязывающей дырочных орбиталей. Дырка делокализуется между двумя квантовыми точками, основное (первое возбужденное) состояние дырки - симметричная (антисимметричная) комбинация волновых функций дырок отдельных КТ. При увеличении расстояния между квантовыми точками дырка локализуется преимущественно в одной из точек, основное состояние дырки меняет свою симметрию и становится антисимметричным.
- Определен энергетический спектр двух дырок и пространственная конфигурация дырочных состояний в гетероструктурах Ge/Si, состоящих из двух вертикально совмещенных квантовых точек Ge, для различных размеров квантовых точек и расстояний между ними. Показано, что основным состоянием в такой системе является “спиновый” синглет, а первым возбужденным “спиновый” триплет. При этом роль спина в данной системе играет проекция углового момента на ось симметрии структуры. В точке смены симметрии основного одночастичного состояния дырки в квантовых точках, обменное взаимодействие между двумя дырками имеет минимум, что приводит к вырождению состояний синглета и триплета с нулевой энергетической щелью.

- Определена энергия связи и сила осциллятора экситонных переходов, локализованных в структуре с двумя вертикально совмещенными КТ. Показано, что при расстояниях между квантовыми точками 3-3.5 нм происходит увеличение силы осциллятора основного экситонного перехода по сравнению с случаем одиночной квантовой точки. Максимальное усиление в 5 раз наблюдается для квантовых точек Ge размером 15 нм. В этом случае электрон расположен между квантовыми точками, а дырка делокализована между ними. Как следствие, реализуется максимальное перекрытие волновых функций электрона и дырки, и межзонные переходы становятся прямыми в реальном пространстве.

Практическая ценность результатов

Полученные данные об энергетическом спектре могут найти применение для оптимизации технологических условий синтеза многослойных Ge/Si гетероструктур при проектировании транзисторов, работа которых основана на протекании тока, через отдельные дискретные уровни в квантовых точках, фотодетекторов, работающих на межзонных оптических переходах в квантовых точках, элементах памяти, использующих нанокластеры Ge в качестве источника хранения данных. Создан пакет программ, позволяющих вычислять энергетический спектр в Ge/Si гетероструктурах различных форм и размеров.

Положения выносимые на защиту

- Неоднородное распределение упругих деформаций в многослойных напряженных гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками Ge приводит к формированию связанных электронных состояний в кремнии с энергией до 90 мэВ.
- Асимметрия распределения деформационных полей в двойных, вертикально сопряженных квантовых точках Ge/Si является причиной смены симметрии основного одночастичного состояния дыр-

ки по мере удаления квантовых точек друг от друга и к появлению минимума обменной энергии двухчастичных состояний.

- При расстояниях между квантовыми точками, соответствующих смене симметрии основного одночастичного состояния дырки, кулоновское взаимодействие и упругие деформации приводят к локализации двух дырок на противоположных квантовых точках, и вероятность заполнения одной квантовой точки двумя дырками имеет минимум.
- Для двойных вертикально совмещенных квантовых точек размером от 10 до 20 нм, при расстоянии между квантовыми точками от 3 до 3.5 нм сила осциллятора межзонных переходов увеличивается по сравнению со случаем одиночной квантовой точкой от 3 до 5 раз.

Глава 1

Литературный обзор

1.1 Понятие о квантовых точках

В начале 70-х годов прошлого века успехи в области выращивания полупроводниковых слоев и пленок позволили создать принципиально новый класс объектов - квантовые ямы [12]. В таких системах происходит ограничение движения носителей заряда в направлении, перпендикулярном плоскости структуры. Дальнейшее развитие технологии привело к тому, что стало возможным формировать квантовые проволоки, в которых происходит ограничение движения носителей заряда в двух направлениях [13]. В 1986 г. авторы из Texas Instruments Incorporated [14] и одновременно из AT&T Bell Laboratories [15, 16] и Bell Communication Research Incorporated [17] получили первые системы, в которых происходит ограничение движения заряда по всем трем направлениям - квантовые точки.

Квантовые точки представляют собой предельный случай систем с пониженной размерностью, поскольку пространственное ограничение движения носителей заряда реализуется в них во всех трех измерениях. Размерность электронных состояний в КТ считают равной нулю, и в этом смысле они являются искусственными аналогами атомов. Электронный спектр идеальной КТ представляет собой набор дискретных уровней, как и в атомах, хотя реальная точка может состоять из де-

сятков тысяч атомов. На рис.1.1 показаны схематические диаграммы функции плотности состояний для трехмерной системы, квантовой ямы, квантовой проволоки и квантовой точки. Несмотря на общность многих квантово-размерных эффектов, возникающих во всех структурах пониженной размерности, существует одно принципиальное отличие квазиуменьшенных систем от других квантово-размерных структур — в квантовой точке в отличие от квантового слоя или квантовой проволоки свойства электронов и дырок нельзя описать на основе представления о газе квазичастиц. Открывающиеся возможности создания искусственных “атомов”, допускающих

- контроль числа носителей на атомоподобных оболочках, а значит моделирование различных существующих элементов, а также тех, которые еще не найдены в природе;
- моделирование “атомов”, на орбитах которых находятся не электроны, а дырки, а также таких, которые содержат и электроны и дырки (“экситонные атомы”);
- контроль структуры электронного спектра и формы волновых функций путем изменения формы точек или связывающего носителя потенциала,

позволяют проверить на опыте многие теоретические гипотезы атомной физики на макроскопических объектах, а также наблюдать новые эффекты, еще не описанные в традиционных рамках квантовой физики реальных атомов.

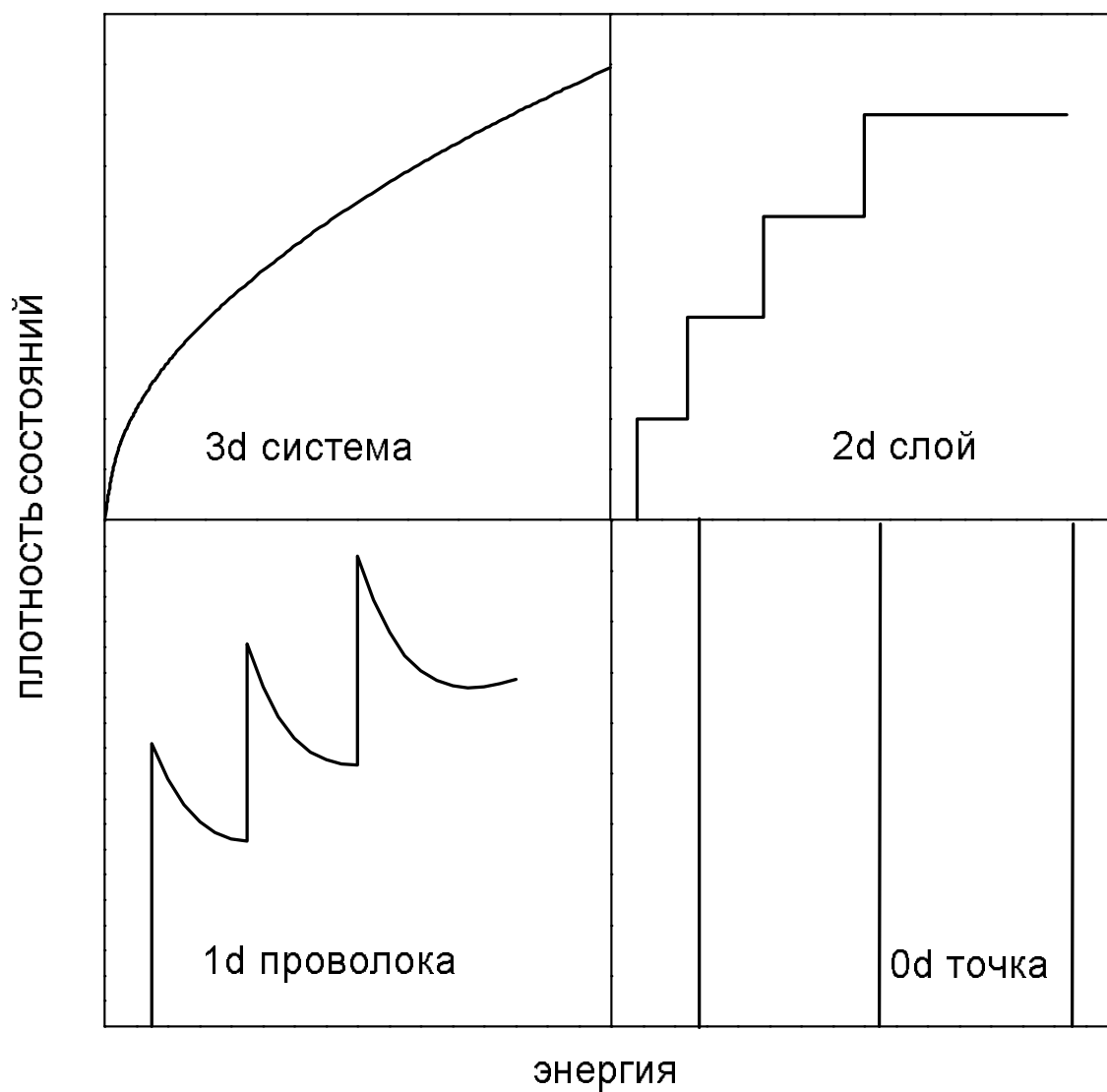


Рис. 1.1. Схематичные диаграммы функции плотности состояний для систем различной размерности.

Самые первые квантовые точки были сформированы путем “обрезки” двумерного электронного газа с помощью электронной литографии. Дальнейшее развитие технологии привело к использованию новых методов формирования квантовых точек, таких как модуляция плотности двумерного электронного газа электрическим полем, селективный рост, самоорганизация и др.

Наибольшую привлекательность для изучения представляют собой массивы КТ, полученные методом самоорганизации в результате роста упруго напряженных систем. К таким системам относятся например InAs/GaAs и Ge/Si. Можно выделить несколько стадий роста эпитаксиальной пленки. На первом этапе происходит рост сплошной, упруго напряженной пленки. По достижению некоторой критической толщины (2 монослоя (МС)) для чистого InAs/GaAs и 4 МС для Ge/Si при росте на поверхности (001)) происходит переход от двумерного к трехмерному островковому росту. При этом начинают формироваться так называемые “hut”-кластеры [рис. 1.2(a)], островки, ограниченные гранями $\{105\}$ (поверхность (001)). При дальнейшем увеличении количества осаждаемого материала происходит переход от “hut” к “dome”-кластерам [рис. 1.2(b)], напряжения в которых более релаксированы по сравнению с “hut”-кластерами. Данный механизм роста носит названия механизма Странского-Крастанова. Заметим, что данный метод привлекателен тем, что с его помощью можно формировать квантовые точки очень малого ~ 10 нм размера с очень высокой плотностью $\sim 10^{11}$ см $^{-2}$ [20]. В работе [20] детально описано формирование КТ Ge/Si в режиме роста по механизму Странского-Крастанова.

КТ, сформированные любым из вышеперечисленных методов, можно разделить на два типа по тому, как в них локализуются носители заряда. В КТ I-го типа потенциальная яма образуется для носителей обоих знаков, поэтому в таких КТ происходит локализация как электронов, так и дырок. Типичным представителем гетероструктур с КТ

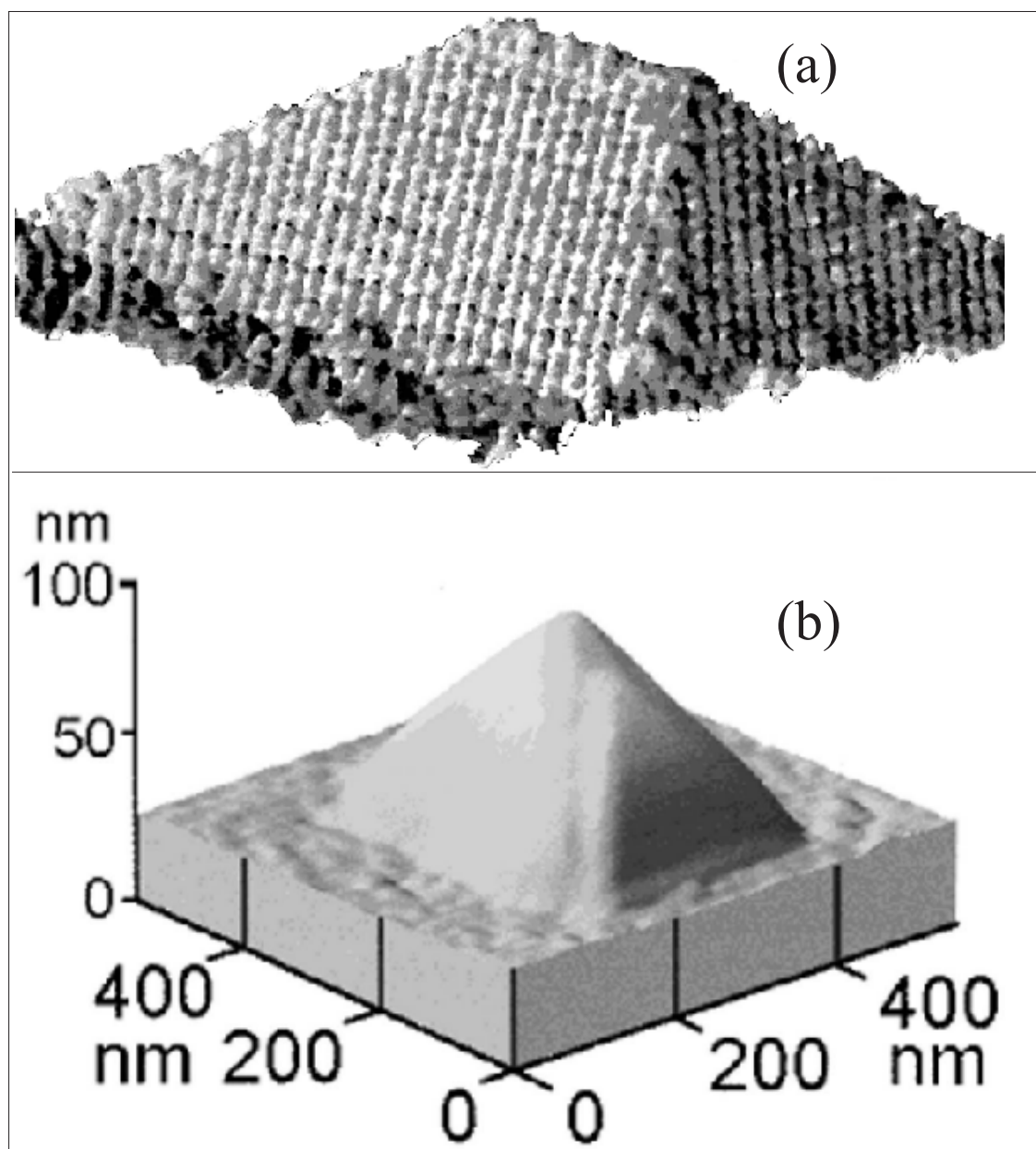


Рис. 1.2. (а) Объемное изображение “hut”-кластера полученное с помощью сканирующей туннельной микроскопии. Размеры основания 20×40 нм, высота 4 нм. Изображение получено в работе [18] (б) Объемное изображение “dome”-кластера полученное с помощью сканирующей туннельной микроскопии. Изображение получено в работе [19]

I-го типа являются КТ InAs/GaAs. Зонная диаграмма КТ I-го типа схематично изображена на рис. 1.3(а). В КТ II-го типа потенциальная яма образуется только для носителей заряда одного знака, а в другой зоне формируется потенциальный барьер. Типичным представителем КТ II-го типа являются системы Ge/Si, GaSb/GaAs. Зонная диаграмма КТ II-го типа представлена на рис. 1.3(б).

1.2 Гетероструктуры Ge/Si с квантовыми точками Ge

В гетеросистемах Ge/Si экспериментально наблюдается несколько стадий эволюции островков Ge в процессе увеличения эффективной толщины осаждаемой пленки Ge [21]. Эти стадии различны для подложек с ориентацией (001) и (111).

Трехмерные островки Ge, образующиеся на Si (111), представляют собой трехгранные пирамиды с плоской вершиной и боковыми гранями {113}, причем даже на начальных стадиях такие кластеры могут содержать дислокации несоответствия [22]. Высота островков находится в пределах 0.10-0.13 от их поперечных размеров. При такой ориентации подложки область условий существования когерентных островков отсутствует вовсе либо крайне узка.

С приборной точки зрения уникальной является поверхность (001), поскольку на них обнаружены бездислокационные объемные островки размером 10 - 100 нм [23]. Появление таких островков наблюдается после образования сплошной пленки Ge. Этот момент четко фиксируется по резкому уменьшению интенсивности зеркально отраженного пучка быстрых электронов.

В связи с тем, что на гетероструктурах Ge/Si можно применить кремниевую технологию, развитие этого направления идет постоянно растущими темпами. На данный момент уже достаточно хорошо

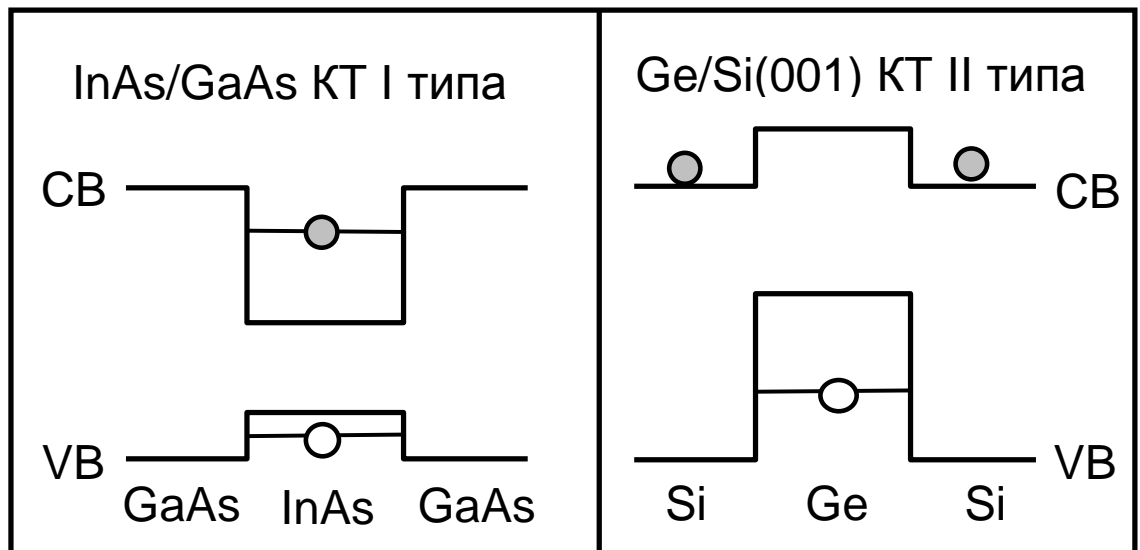


Рис. 1.3. Зонная диаграмма КТ I-го типа (слева) на примере GaAs/InAs квантовых точек и II-го типа (справа) на примере Ge/Si квантовых точек

исследованы электрические и оптические свойства массивов квантовых точек Ge/Si как теоретически [24], так и экспериментально [20]. Рассмотрим основные экспериментальные результаты, полученные на массивах квантовых точек Ge/Si.

1.2.1 Электрические свойства

Электронная туннельная спектроскопия. Впервые этот метод спектроскопии по отношению к массивам самоорганизующихся КТ был применен в работе [25]. Исследуемая структура представляла собой два параллельных электрода (сильно легированные бором слои $\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$), между которыми через туннельные барьеры (прослойки Si) был заключен слой нанокристаллов Ge [26]. Использовались два типа структур: а) с симметричными кремневыми барьерами, толщиной 9 нм; б) с асимметричными кремниевыми барьерами, толщиной 6 и 9 нм. Измерение туннельных характеристик в структуре с симметричными барьерами позволило определить расстояние между уровнями размерного квантования, которое составило 75 мэВ. В асимметричной структуре, при полярности напряжения, обеспечивающей прохождение дырки сначала через тонкий, а затем через толстый барьер, происходило накопление заряда в квантовой точке из-за различия коэффициентов прохождения. Из-за накопления заряда становятся существенными становятся процессы кулоновских корреляций носителей, обусловленных их взаимодействием. Кулоновское взаимодействие “снимает” вырождение одночастичных уровней размерного квантования, поскольку дырке требуется преодолеть энергию электростатического отталкивания носителей, уже локализованных в КТ. Подобный эффект получил название “кулоновской лестницы”. Из расстояния между пиками проводимости можно оценить корреляционную энергию дырок в островках: $E_{QC} \approx 35$ мэВ в основном состоянии и $E_{QC} \approx 18$ мэВ в первом возбужденном состоянии.

Эффект поля. Изменение проводимости МДП транзисторов, в которых проводящий канал включает слой нанокристаллов Ge, оказалось достаточно информативным для изучения эффектов электронных корреляций и размерного квантования [27]. Последовательное заполнение островков дырками осуществлялось приложением потенциала к затвору транзистора. При используемых плотностях островком Ge ($\sim 3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$) существенными становятся туннельные переходы между состояниями, локализованными в различных островках. Вероятность “перескоков” дырки между квантовыми точками определяется: а) перекрытием волновых функций заполненного и незанятого состояния и б) степенью заполнения дырочной оболочки. Если соответствующий уровень заполнен точно наполовину, то проводимость должна быть максимальна, а энергия активации переходов должна определяться электростатической энергией взаимодействия данной дырки со всеми зарядами в нанокристаллах. При полном заполнении уровня носитель в процессе туннелирования вынужден переходить на возбужденные состояния следующей оболочки. При этом энергия активации возрастает на величину, равную энергии размерного квантования, а проводимость уменьшается. При дальнейшем заполнении возбужденного состояния энергия активации, требуемая для помещения носителя на данный уровень в других точках, уменьшается и снова начинает определяться электрон-электронным взаимодействием, что приводит к росту величины прыжковой проводимости и так далее. Таким образом величина прыжковой проводимости при фиксированной температуре, а так же энергия активации проводимости должны осциллировать при изменении затворного напряжения, отражая тем самым структуру спектра состояний. Такие осцилляции присущи лишь нульмерным системам, в которых электронный спектр носит дискретный характер.

Осцилляции прыжковой проводимости в условиях эффекта поля

были обнаружены в МДП транзисторах с эффективной толщиной Ge более 6 нм и содержащих до 10^9 островков Ge [27]. Подложкой служила высокоомная пластина Si *n*-типа. В области низких температур ($T < 9$ К) на зависимостях проводимости канала от затворного напряжения были обнаружены осцилляции, соответствующие заполнению основного и возбужденного состояний в КТ.

Спектроскопия дырочных уровней. Существует несколько методов исследования полупроводниковых гетероструктур в которых ключевую роль играют процессы захвата и эмиссии дырок на локальные уровни. К ним метод вольт-фарадных характеристик, нестационарная емкостная спектроскопия глубоких уровней (DLTS), спектроскопия полной проводимости.

В методе вольт-фарадных характеристик измеряется емкость структуры, содержащей слой квантовых точек при приложении малого переменного сигнала. При определенных условиях на одном полупериоде переменного сигнала захват носителей на уровни квантовых точек преобладает над эмиссией, а на другом эмиссия с локализованных состояний в квантовых точках преобладает над захватом. Поэтому слой квантовых точек работает подобно конденсатору, перезаряжаясь на частоте переменного сигнала. Меняя постоянное напряжение, приложенное к структуре, содержащей слой квантовых точек можно определять концентрацию носителей заряда в образце, судить о количестве заряда, локализованного в квантовых точках и о плотности состояний. Подробно метод определения плотности состояний по вольт-фарадным характеристикам был развит в работе [28]. В методе спектроскопии полной проводимости (адмитанса) [29] измеряется мнимая часть емкости структуры в как функция температуры и частоты. По этой зависимости восстанавливается скорость эмиссии дырок как функция температуры. Как правило, температурная зависимость скорости эмиссии имеет активационный характер, и соответствующая

энергия активации определяет положения уровня в квантовой точке. В методе DLTS исследуется кинетика релаксации емкости системы, содержащей глубокие уровни, к равновесному состоянию после снятия внешнего воздействия. Положение уровней вычисляется из температурной зависимости времени релаксации.

Наиболее точную картину дает спектроскопия полной проводимости. По аналогии с глубокими уровнями в полупроводниках [30, 31] принцип спектроскопии адмиттанса структур с квантовыми точками основан на измерении комплексной проводимости системы, возникающей при перезарядке КТ вследствие эмиссии носителей заряда из КТ в разрешенные зоны и их обратного захвата на связанные состояния в КТ.

1.2.2 Оптические явления в структурах Ge/Si с квантовыми точками

Оптические явления в гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками Ge содержат в себе обширный класс явлений и методик исследования гетероструктур с квантовыми точками. Так, например, в работе [32] была измерена фотолюминисценция от 10 слоев вертикально совмещенных квантовых точек. Было показано, что на базе таких структур можно изготовить $p-i-n$ -фотодиоды с плотностью темнового тока порядка 3×10^{-5} А/см². В этих структурах удалось добиться квантового выхода порядка 8%.

В работе [33] исследовалась электролюминисценция многослойных структур, содержащих 10 слоев “hut”-кластеров Ge. В работе было показано, что при использовании гетероструктур с одним слоем нанокластеров Ge в спектре электролюминисценции преобладает линия, соответствующая излучательной рекомбинации из слоев легированного кремния. Однако, при использовании 10-ти слоев нанокластеров преобладал сигнал электролюминисценции от Ge нанокластеров. В такой

структуре удалось наблюдать электролюминисценцию от Ge нанокластеров при температуре вплоть до комнатной.

В работе [34] исследовалась фотолюминисценция от сверхрешетки Ge/Si слоев с вертикально совмещенными нанокластерами Ge с различным количеством периодов сверхрешетки. В работе было показано возникновение фотолюминисценции при комнатной температуре, если число периодов сверхрешетки превышает 15. В Работе для объяснения данного явления была использована минизонная модель [35], суть которой состоит в образовании минизоны для электронов в кремнии при чередовании периодов сверхрешетки.

В работе [36] рассматривалась электролюминисценция гетероструктур Ge/Si с различным числом слоев вертикально совмещенных квантовых точек. В работе было обнаружено, что при увеличении числа слоев вертикально совмещенных квантовых точек Ge/Si до 30 усиливается фотолюминисценция при комнатной температуре. Так же было обнаружено, что в структуре с 30 слоями квантовых точек Ge наблюдается синий сдвиг линии фотолюминисценции.

В работе [37] рассматривалась возможность использования многослойных гетероструктур Ge/Si с квантовыми точками и квантовыми ямами в качестве материала для болометров и терморезисторов инфракрасного диапазона. Было показано, что, используя структуру с 4-мя слоями квантовых точек, можно изготовить терморезистор с коэффициентом термосопротивления $3.4\%/K$, при этом коэффициент шума типа $1/f$ составляет 2×10^{-9} . В таких структурах удалось добиться большого соотношения сигнал-шум.

Возможность использования слоев квантовых точек для фотодетекторов инфракрасного диапазона была рассмотрена в работе [38]. В данной работе был предложен новый вариант фотодетектора, в котором используется эффект фотопроводимости вдоль слоя квантовых точек. В таком фотоприемнике удалось достичь чувствительности в

10 мА/Вт при энергии фотона в 238 мэВ.

Наблюдение фототока на длине волны 3.1 мкм и 6.2 мкм в гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками Ge наблюдалось в работе [39]. В этой работе наблюдался красный сдвиг фототока с увеличением температуры, который объяснялся электрическим полем экситона, при инфракрасном возбуждении при низких температурах.

Таким образом, в большем количестве работе экспериментально обнаружено улучшение оптических свойств гетероструктур Ge/Si с вертикально совмещенными квантовыми точками Ge по сравнению со структурами с одиночными слоями Ge. Результаты таких экспериментов стимулируют разработку реалистичных моделей описания электронных свойств гетероструктур Ge/Si с вертикально совмещенными квантовыми точками Ge.

1.2.3 Распределение упругой деформации в Ge/Si квантовых точках

Существует два основных подхода к описанию упругой деформации твердых тел: макроскопический и микроскопический. Макроскопический подход оперирует величинами, усредненными по масштабу, большому по сравнению с периодом решетки. Эти усредненные величины (вектор смещения, тензор деформации и др.) рассматриваются как непрерывные функции координат. Микроскопические же модели, наоборот, оперируют величинами, связанными с конкретными атомами.

Макроскопический подход, по сути, представляет собой использование уравнений теории упругости [40]. Чтобы решить эти уравнения численно, необходима дискретизация, то есть переход от бесконечного числа переменных (векторов смещения в каждой точке пространства) к конечному набору величин. Для этого используется два метода: метод конечных разностей и метод конечных элементов.

Для анализа распределения деформаций в квантовых точках при-

меняется как метод конечных разностей, так и конечных элементов. Оба эти метода превращают систему уравнений (в частных производных) в конечную систему линейных уравнений. Для численного решения такой системы, как правило, используется алгоритм сопряженного градиента.

В методе конечных разностей производные в дифференциальных уравнениях заменяются на конечные приращения, при этом вместо значений смещения всех точек пространства в задаче остаются только значения смещений в узлах сетки. Для кубических кристаллов наиболее подходящей сеткой является простая кубическая с шагом, равным постоянной решетки кристалла.

Метод конечных элементов состоит в том, что все пространство разбивается на конечные объемы (обычно в форме тетраэдра), и деформации каждого такого тетраэдра считаются зависящими от конечного числа параметров – смещений вершин тетраэдра. После чего минимизируется упругая энергия как функция смещений всех вершин тетраэдров.

Из микроскопических методов описания деформации в структуре с квантовыми точками наиболее часто применяется модель поля валентных сил (valence force field). В этой модели предполагается, что упругая энергия зависит только от положения атомных ядер, составляющих кристаллическую решетку, причем учитывается взаимодействие только между соседними ядрами в решетке. Наиболее простую форму потенциала для модели поля валентных сил предложил Китинг [41]. Потенциал Китинга (см. формулу 1.1) содержит только два независимых параметра. Один параметр определяет “жесткость” решетки по отношению к удлинению/укорочению межатомных связей; второй параметр определяет сопротивляемость решетки по отношению к отклонению углов между связями от равновесного (тетраэдрического) угла. Модель Китинга довольно хорошо воспроизводит упругие свойства ку-

бических полупроводников (особенно Ge и Si), несмотря на то, что в кубических кристаллах три независимых модуля упругости, а модель Китинга располагает только двумя подгоночными параметрами.

$$W = \frac{3}{16} \sum_i \sum_j \frac{\alpha_{ij}}{d_{ij}^2} \left[(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2 - d_{ij}^2 \right]^2 + \frac{3}{8} \sum_i \sum_{j>k} \frac{\beta_{ijk}}{d_{ij}d_{ik}} \left[(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k) + \frac{d_{ij}d_{ik}}{3} \right]^2. \quad (1.1)$$

Здесь индексы i, j, k нумеруют атомы, причем индекс i пробегает по всем атомам, j в первой сумме - по всем ближайшим соседям i -го атома, а пара индексов (j, k) во второй сумме соответствует всем парам ближайших соседей атома i , \mathbf{r} - координата атома, d_{ij} - длина ненапряженной связи, а α_{ij} и β_{ijk} - силовые константы.

Среди работ, в которых деформация в квантовых точках вычисляется на основе микроскопических методов, большинство использует потенциал Китинга. Нахождение положений атомов, минимизирующих упругую энергию, сводится к решению системы $3N$ уравнений, где N - число атомов; для численного решения обычно используют алгоритм сопряжённого градиента, хотя в некоторых работах просто последовательно смещали атомы в направлении действующей на них упругой силы, до тех пор, пока силы не станут пренебрежимо малыми. В работе [42] использовался более сложный потенциал VFF-типа, содержащий пять независимых параметров. В работе [43] применена модель Китинга для решётки вюрцита при расчёте деформации в InGaN квантовых точках. В работе [44] в 1999 г. использован метод молекулярной динамики для получения распределения упругих напряжений по свободной поверхности в структурах Ge/Si с квантовыми точками. В работе [45] в 2001 г. выполнен расчёт деформации в структуре с пирамидальной Ge квантовой точкой в Si для двух видов потенциала: потенциал Китинга и потенциал Стилинджера-Вебера (обычно

используемый в моделировании методом молекулярной динамики).

Результаты определения деформации сильно зависят от того, используется ли для расчетов приближение сплошной среды или модель поля валентных сил. Сопоставление этих результатов производилось в работах [46, 47]. Отмечено, что вблизи гетерограниц модель поля сплошных сил и приближение сплошной среды дают существенно различающиеся результаты. Для остальных областей различие было вызвано главным образом тем, что модель Киттинга неточно описывает упругие свойства среды. Для гетероструктур Ge/Si эта неточность значительно меньше, чем для InAs/GaAs. Ошибки подгонки упругих свойств параметрами модели Киттинга составляют 1% и 7% соответственно для Si и Ge и 13% и 22% для GaAs и InAs [46].

1.2.4 Электронная структура

Задачу определения электронной структуры квантовых точек можно разделить на две части: одночастичная задача (энергетический спектр электронов и дырок, волновые функции, переходы между энергетическими уровнями, g -фактор и т. п.) и многочастичная задача (состояние нескольких электронов/дырок в квантовой точке, экситоны и экситонные комплексы). Как и для расчета деформации, нахождение энергетического спектра может быть либо макроскопическими (приближение эффективной массы), либо микроскопическими методами (приближении сильной связи, эмпирический или *ab initio* псевдопотенциал).

К первым относятся разные варианты метода эффективной массы основанные на $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ методе [48] и включающие в рассмотрение от одной до восьми зон. Однозонная модель использовалась в ранних расчётах спектра квантовых точек в системе InAs/GaAs [49]; в ней учитывались только зона проводимости (для определения электронных уровней) и подзона тяжёлых дырок (для дырочных уровней). В более поздних

работах [42, 46, 50, 51] использовались гамильтониан 4×4 , описывающий две ветви валентной зоны, или 8×8 , в котором рассматриваются три ветви валентной зоны и зона проводимости. Влияние деформации в рамках метода эффективной массы может быть учтено с помощью констант деформационного потенциала; но существуют и более сложные варианты, включающие в рассмотрение градиент тензора деформации и влияние деформации на эффективные массы [52].

Уравнение Шрёдингера, возникающее в методе эффективной массы, обычно решается численно с применением конечных разностей; шаг сетки, на которой производится дискретизация, обычно выбирается равным постоянной решётки, и затем гамильтониан диагонализуется с помощью современных численных методов для разреженных матриц, таких как, например, алгоритм Ланцоша [53]. В работах [42, 54–56], однако, для решения уравнения Шрёдингера использовались не конечные разности, а разложение огибающей волновой функции по плоским волнам; для получения приемлемой точности требовалось порядка $1 \div 7 \cdot 10^3$ плоских волн. J.H.Seok и J.Y.Kim [55] в 2001 г. впервые рассчитали спектр дырок и электронов в Ge/Si пирамидальной квантовой точке; однако они допустили, на наш взгляд, серьёзную ошибку, из-за которой их расчёты далеки от действительности: в их модели использовались изотропные эффективные массы для электронов и дырок, между тем как известно, что для электронов в кремнии продольная и поперечная массы отличаются в 5 раз, а у дырок в Ge масса в направлении $\langle 100 \rangle$ в 2.5 раза меньше, чем в направлении $\langle 111 \rangle$.

В работе [51] проведено сравнение разных вариантов метода эффективной массы, отличающихся количеством учтенных зон, при расчёте энергетического спектра в InAs пирамидальных квантовых точках. Так, для зоны проводимости сравнивался однозонный подход (учитывающий только зону проводимости в Γ -долине) с 8-зонным (т. е. наиболее полным, учитывающим все близлежащие зоны). Разница оказалась

довольно заметной, но ошибка 1-зонного метода может быть компенсирована увеличением модельного размера пирамиды на 1.5 нм (с 12.5 до 14 нм). Для состояний валентной зоны сопоставлялись 4-, 6- и 8-зонный варианты. Оказалось, что 6-зонная модель даёт завышенные (по сравнению с более полной 8-зонной) значения энергий дискретного спектра, а при переходе к ещё менее точной 4-зонной модели эта ошибка почти пропадает! Объясняется это тем, что в 4-зонной модели две ошибки компенсируют друг друга: одна, связанная с неучётом состояний зоны проводимости, и другая, связанная с неучётом состояний отщеплённой зоны дырок. (В 6-зонной модели не учитываются только состояния зоны проводимости.) В работе [46] проведено сравнение результатов расчётов электронных и оптических свойств в аналогичных InAs/GaAs точках, выполненных с помощью двух разных моделей упругой деформации: макроскопической (приближение сплошной упругой среды) и микроскопической (модель Китинга). Различия оказались незначительными. Отметим, что в упомянутой работе [46] содержится наиболее полное теоретическое исследование по InAs квантовым точкам, включая энергию кулоновского взаимодействия двух электронов в точке, связи экситонов, энергию связи экситона, энергии и силы осциллятора оптических переходов (межзонных и межуровневых).

Применимость метода эффективной массы ограничивается следующими обстоятельствами. Во-первых, величины, входящие в гамильтониан – внешние поля, деформации, – должны быть достаточно “плавными”, т.е. их изменение на расстояниях порядка постоянной решетки должны быть малыми. Во-вторых, рассматриваемый энергетический уровень должен быть достаточно удаленным от зон, не включенных в модель (по сравнению с расстоянием до учтенных зон), это ограничение связано с использованием $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -метода.

Чтобы выйти за рамки первого ограничения применяют микроско-

пические методы, такие как метод сильной связи и метод псевдопотенциала.

Метод сильной связи или метод линейных комбинаций атомных орбиталей широко применяется для моделирования зонной структуры как объемных полупроводников, так и наноструктур. Суть метода состоит в том, что волновая функция ищется в виде суперпозиции некоторого фиксированного набора исходных функций – атомных орбиталей. Диагональные матричные элементы равны энергиям соответствующих орбиталей, а недиагональные – энергетическим интегралам перекрытия между орбиталями. Как правило, энергии орбиталей и интегралы перекрытия рассматриваются как подгоночные параметры, и их значения подбираются так, чтобы вычисленная с этими значениями зонная структура рассматриваемого вещества имела правильный вид.

В методе псевдопотенциала [57] решается уравнение Шредингера обычного вида (1.2).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi. \quad (1.2)$$

Здесь ψ – “настоящая” волновая функция (а не огибающая функция, как в методе эффективной массы). Потенциал U представляет собой сумму псевдопотенциалов, связанных с отдельными атомами и зависящих от типа атома и от деформации в его окружении. Так как потенциал U и волновая функция ψ сильно изменяются (осциллируют) в пределах элементарной ячейки кристалла, то для численного решения уравнения Шредингера нужно вводить сетку с периодом, малым по сравнению с периодом кристаллической решетки.

Методы сильной связи и псевдопотенциала обычно применяются к квантовым точкам, которые не соединены с полупроводниковой матрицей. Это связано с тем, что микроскопические методы требуют больших затрат машинного времени и памяти нежели микроскопические и поэтому включение в расчет области, примыкающей к квантовой

точке сильно усложняет задачу.

Не привязанные к подложке (free-standing) квантовые точки обычно моделировались кластерами в форме шара или куба. Большинство работ по моделированию таких квантовых точек относится к кластерам Si [58–60] (эти работы стимулированы, в основном, экспериментальными результатами по люминесценции пористого кремния), но есть работы и по Ge [61], InP [62] и CdSe [63] free-standing квантовым точкам. (В эксперименте нанокластеры Ge в SiO₂ получают с помощью магнетронного со-распыления (cosputtering) Ge и SiO₂ и другими методами; кластеры InP и CdSe - посредством химического синтеза.) В работе [63] метод сильной связи использован для вычисления g-фактора в нанокристаллах CdSe.

Метод псевдопотенциала в расчётах квантовых точек применяется в двух разновидностях: как эмпирический (с параметрами, подогнанными под экспериментальные параметры зонной структуры объёмного полупроводника) [57], так и ab initio (с параметрами, найденными “из первых принципов”) [62]. Тогда как метод сильной связи используется только как эмпирический (следуя Дж.К.Слэтеру и Г.Ф.Костеру, которые в своей классической работе [64] предложили использовать метод сильной связи как интерполяционную схему для расчётов зонной структуры).

К пирамидальным квантовым точкам, самоформирующимся при эпитаксии, метод сильной связи был впервые применён в 1998 г. T.Saito и др. [65], метод псевдопотенциала - в 1999 г. L.-W. Wang и др. [57] для расчёта квантовых точек InAs. Использованная в работе [65] модель, однако, была не вполне реалистичной, так как не учитывалось проникновение волновой функции в материал подложки и, кроме того, при расчёте деформации подложка рассматривалась как абсолютно жёсткая. Вычисление спектра квантовых точек методом сильной связи, использующее корректную модель деформации и включающее в

расчёт атомы матрицы, было выполнено теми же авторами в системе InGaN/GaN в 2002 г. [43] и R.Santoprete и др. в системе InAs/GaAs в 2003 г. [66].

Перейдём теперь к рассмотрению методов решения многочастичных задач в квантовых точках. Эта область весьма обширна, поэтому в настоящем обзоре будет представлена только фрагментарно. Основным отличием данных методов является учет различных типов взаимодействия между частицами. Простейшая модель, описывающая состояния нескольких электронов в квантовой точке, - это модель постоянного взаимодействия (constant-interaction model) [67]. Данная модель довольно хорошо воспроизводит зависимость электрохимического потенциала от числа электронов и величины магнитного поля в квантовых точках, сформированных на основе двумерного электронного газа и содержащих порядка 10 электронов. В этой модели принимается, что кулоновское взаимодействие электрона в точке со всеми остальными электронами описывается одним параметром - постоянной емкостью C . Тогда энергия $U(N)$ основного состояния системы N электронов в квантовой точке выражается в виде

$$U(N) = \frac{[e(N - N_0)]^2}{2C} + \sum_{n=1}^N E_n, \quad (1.3)$$

где e - заряд электрона, E_n - одночастичная энергия n -го электрона. Электрохимический потенциал квантовой точки $\mu_{dot}(N)$ равен $U(N) - U(N - 1)$, а энергия добавления (addition energy) электрона равна $\mu_{dot}(N + 1) - \mu_{dot}(N)$. Одночастичные энергии электронов в параболическом потенциале в магнитном поле определяются решением Фока-Дарвина [67, 68] и описываются двумя квантовыми числами n, l (радиальное и угловое). Обменное взаимодействие учитывается в виде отрицательной добавки к полной энергии, пропорциональной количеству пар взаимодействующих частиц, причём для простоты учитывается обменное взаимодействие только между электронами с одинако-

выми n и противоположными l . Такая модель воспроизводит экспериментально наблюдаемую схему заполнения двумерных электронных оболочек и правило Хунда (если введена поправка на обменное взаимодействие), а также зависимость электрохимического потенциала от магнитного поля.

Модель постоянного взаимодействия справедлива при таких параметрах квантовых точек, что электрон-электронное взаимодействие не приводит к существенным изменениям одночастичных волновых функций. В противном случае применяются методы самосогласованного поля.

А.В. Чаплик в 1989 г. [69] применил метод Хартри-Фока к расчёту спектров гелие- и литиеподобных квантовых точек ($N=2, 3$) с параболическим двумерным удерживающим потенциалом, а также получил решение (в аналитическом виде) модели Томаса-Ферми для случая $N \gg 1$. Полученные результаты позволили правильно проинтерпретировать экспериментальные результаты по поглощению инфракрасного излучения системой квантовых точек на основе двумерного газа.

В работе [46] методом Хартри определена энергия связи экситона и энергия взаимодействия двух электронов в квантовой точке 1-го типа InAs в матрице GaAs. Полученная зависимость от размеров квантовой точки демонстрировала монотонный характер (уменьшение обеих энергий с увеличением размера).

В работе [70] решена задача нахождения состояния экситона в сферической квантовой точке в два этапа. На первом этапе были рассмотрены одночастичные задачи и получены волновые функции электрона ($\psi_e(\mathbf{r}_e)$) и дырки ($\psi_h(\mathbf{r}_h)$). На втором этапе вариационным методом была найдена волновая функция экситона ($\Phi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$), в качестве пробной функции была использована функция вида $\Phi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \psi_e(\mathbf{r}_e)\psi_h(\mathbf{r}_h) \exp(-\alpha|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|)$ с варьируемым параметром α . На основе полученных результатов авторы интерпретируют экспериментальные

данные по фотолюминесценции для Si и Ge наноструктур. В частности, данные результаты позволили косвенно определить диапазон размеров формирующихся квантовых точек.

В работе [71] был использован метод точной диагонализации для определения энергий и интенсивностей фотолюминесценции состояний N электронов ($N = 1 \div 9$) и одной дырки в квантовой точке с параболическим удерживающим потенциалом. Были изучены эффекты электрон-электронного взаимодействия на спектр фотолюминесценции, и показано, что из данных фотолюминесценции можно получить информацию о количестве электронов в квантовой точке, магнитном поле и поляризации света.

В работе [72] исследовалось заполнение электронных оболочек в квантовой точке, распределение электронной плотности и парная корреляционная функция в зависимости от температуры с помощью квантового метода Монте-Карло. Получено хорошее соответствие между вычисленными энергиями добавления (addition energy) электронов в квантовую точку и экспериментальными значениями этих величин.

В последнее время для расчёта свойств многоэлектронных квантовых точек широко применяются методы теории функционала плотности [73] и функционала спиновой плотности [74]. С ростом числа частиц, рассматриваемых в задаче, растут недостатки других методов расчета. Точная диагонализация полного гамильтониана ограничена малым числом электронов (дырок). Методы Томаса-Ферми, Хартри, Хартри-Фока страдают от значительных ошибок, связанных с корреляционными и обменными взаимодействиями. Метод теории функционала плотности и функционала спиновой плотности позволяют преодолеть данные трудности и решить задачу с учетом корреляций и обменного взаимодействия.

В работах [75, 76] был применен метод конфигурационного взаимодействия (configuration interaction) к исследованию состояний двух

электронов в структуре, содержащей две вертикально совмещенные квантовые точки InAs/GaAs. Исследовались энергии связи электронов и парные корреляционные функции электронов в различных состояниях.

Глава 2

Методика расчета и эксперимента

2.1 Расчет неоднородного распределения упругих деформаций

Традиционно расчет энергетического спектра наноструктур начинают с расчета упругих деформаций, возникающих при формировании таких структур. Расчет деформаций может быть проведен с использованием двух принципиально различающихся подходов: 1) Атомистический подход, при котором деформации выражаются через смещения из положения равновесия каждого атома структуры; 2) Приближение сплошной среды. Во втором случае пренебрегается внутренней кристаллической структурой островка и окружающей матрицы, они полагаются сплошными материалами, а рассогласование параметров решетки в таких структурах входит в качестве начальных величин.

Преимущества атомистического подхода в том, что можно рассчитывать деформации от сколь угодно малых включений инородного материала. В сочетании с методом линейной комбинации атомных орбиталей этот метод дает возможность рассчитывать электронную структуру для нанокластеров произвольной формы и размера. Ограничений “снизу” по размеру нанокластера для этих методов нет. Главным недостатком данного метода является большое количество переменных, которое необходимо учитывать. Помимо атомов нанокластера,

при расчете деформаций необходимо ещё учитывать атомы окружающей матрицы, в которую проникают деформации от нанокластеров. Деформации матрицы влияют на формирование потенциальных барьеров для носителей заряда, а значит и на энергетический спектр носителей заряда в нанокластерах.

Метод сплошной среды использует величины усредненные по объему материала. Поэтому применять этот метод для очень маленьких нанокластеров не корректно. Существуют работы в которых проводилось сравнение корректности использования приближения сплошной среды для расчета деформаций в нанокластерах в сравнении с атомистическим подходом [46, 47]. В этих работах показано, что для нанокластеров размером более 10 нм приближение сплошной среды дает результаты достаточной точности. Для того, чтобы можно было использовать компьютерные подходы для расчета деформаций “сплошную среду” нанокластера и окружающей матрицы необходимо дискретизовать и производить расчет в определенных точках пространства. Существует два подхода к такой дискретизации: 1) метод конечных разностей и 2) метод конечных элементов.

В методе конечных разностей в пространстве выбирается сетка узлов в которых вычисляются значения смещений и других величин. Производные в дифференциальных уравнениях записываются с помощью разностных схем, в которые входят значения функций в узлах сетки. Сетки для подобных вычислений используются чаще всего прямоугольные.

В методе конечных элементов пространство разбивается на элементарные объемы, как правило в форме тетраэдров. Все производные и значения функции рассчитываются в вершинах тетраэдров. А значения функции “внутри” тетраэдра рассчитывается с использованием интерполяционных многочленов по значениям в вершинах тетраэдра. Главное преимущество такого метода в плане сокращения времени сче-

та состоит в том, что можно использовать неравномерную сетку разбиения: в области где деформации меняются быстрее всего (границы нанокластеров) можно использовать густую сетку. А в областях далеких от источника деформации можно строить конечные элементы больших размеров, получая значения деформаций с нужной точностью. По-этому подход, основанный на приближении сплошной среды в сочетании с методом конечных элементов дает существенный выигрыш во времени счета, так как позволяет сократить количество переменных, необходимых для расчета деформаций.

В главе 3 для расчета упругих деформаций был применен атомистический подход. В рамках этого подхода упругие деформации рассчитывались в модели поля валентных сил с использованием межатомного потенциала Киттинга, данный потенциал был описан в литературном обзоре.

В главах 4 и 5 упругие деформации рассчитывали с использованием приближения сплошной среды в программном пакете Comsol Multiphysics. На нулевом этапе расчета задавалась геометрия квантовых точек и начальные напряжения. Начальные напряжения для структуры выбирались как для псевдоморфного слоя, после чего вся система “отпускалась” и в процессе релаксации она приходила в равновесное состояние. Равновесное состояние определялось по минимуму свободной энергии:

$$F = \frac{E_{el}}{2(1 + \sigma)} \left(\varepsilon_{\alpha\beta}^2 + \frac{\sigma}{1 - \sigma} \varepsilon_{\gamma\gamma}^2 \right), \quad (2.1)$$

где E_{el} модуль Юнга, а σ - коэффициент Пуассона материала матрицы или включения.

2.2 Расчет электронной структуры

2.2.1 Одночастичные состояния электронов и дырок

Для расчета электронной структуры двойных квантовых точек были применены континуальные методы. Состояния зоны проводимости рассчитывались в рамках метода эффективной массы, а состояния валентной зоны рассчитывались при помощи различных разновидностей $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -метода, включавшие в рассмотрение от одной до 6 зон. Рассмотрим эти разновидности.

В методе эффективной массы решается уравнение Шредингера

$$-\hbar^2 \left(\frac{\nabla_x^2}{2m_x^*} + \frac{\nabla_y^2}{2m_y^*} + \frac{\nabla_z^2}{2m_z^*} \right) \Psi + U(\mathbf{r})\Psi = E\Psi. \quad (2.2)$$

В этом уравнении уже учтена анизотропия эффективных масс, которая присутствует для электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне. Потенциальная энергия для электрона или дырки, входящая в данное уравнение, усреднена по объему материала. Обычно в потенциальной энергии учитываются разрыв зон на гетерогранице двух полупроводников и внешние электрические, входящие в задачу. Влияние деформаций на потенциальную энергии электрона и дырок учитывается с помощью констант деформационного потенциала [77]. В случае гетероструктур Ge/Si влияние деформаций на модификацию зонной структуры может быть описано с помощью следующих выражений [78]:

для долин Δ^{100} и $\Delta^{\bar{1}00}$

$$U_{el}(\mathbf{r}) = \Xi_d \varepsilon(\mathbf{r}) + \Xi_u \varepsilon_{xx}(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

для долин Δ^{010} и $\Delta^{0\bar{1}0}$

$$U_{el}(\mathbf{r}) = \Xi_d \varepsilon(\mathbf{r}) + \Xi_u \varepsilon_{yy}(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

для долин Δ^{001} и $\Delta^{00\bar{1}}$

$$U_{el}(\mathbf{r}) = \Xi_d \varepsilon(\mathbf{r}) + \Xi_u \varepsilon_{zz}(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

Здесь Ξ_u и Ξ_d - константы деформационного потенциала, $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_{xx}(\mathbf{r}) + \varepsilon_{yy}(\mathbf{r}) + \varepsilon_{zz}(\mathbf{r})$ - след тензора деформации.

Основная деформации в кремнии вблизи квантовых точек имеет вид сжатия по оси z и растяжения в плоскости xy . Такая деформация приводит к расщеплению Δ -минимумов зоны проводимости, и таким образом две $(001$ и $00\bar{1})$ из шести Δ -понижают свою энергию, а остальные четыре повысят. Таким образом электрон в основном состоянии оказывается захваченным в эти две Δ -долины. В германии главным минимумом оказывает L долина, однако под влиянием деформации порядок долин может измениться. Однако поскольку при переходе между Δ и L долинами на гетерогранице электрон должен рассеять значительный импульс, то вероятность междолинного перехода на гетерогранице Ge/Si должна быть низка. В работах [79, 80] исследовалась вероятность междолинного перехода в гетероструктурах GaAs/AlGaAs. С учетом вышесказанного в расчетах электронного спектра в германии мы рассматривали электрон, находящийся в Δ -долине. Таким образом потенциальная энергия для электрона в зоне проводимости может быть записана в виде:

$$U_e(\mathbf{r}) = \Xi_d \varepsilon(\mathbf{r}) + \Xi_u \varepsilon_{zz}(\mathbf{r}) + \Delta E_C^{GeSi} x(\mathbf{r}). \quad (2.6)$$

Здесь ΔE_C^{GeSi} - разрыв зоны проводимости на гетерогранице Ge/Si, а функция $x(\mathbf{r})$ имеет вид:

$$x(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{если } \mathbf{r} \in \text{Si}, \\ 1 & \text{если } \mathbf{r} \in \text{Ge}. \end{cases} \quad (2.7)$$

Величина ΔE_C^{GeSi} была взята равной 0.34 эВ [78].

Расчет энергетического спектра и пространственного распределения волновых функций дырок проводился в рамках 6-ти зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -метода. Согласно работе [81] вклад зоны проводимости в волновую функцию дырки достаточно мал ($\sim 0.5\%$), поэтому от использова-

ния 8-ми зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ - метода решено было отказаться. В то же время согласно результатам из работы [24, 81] вклады подзон легких дырок и подзоны, отщепленной спин-орбитальным взаимодействием для одиночных точек сравнимы ($\sim 8\%$), поэтому использование более простого 4-х зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -метода недостаточно для полного описания состояний дырок в двойных квантовых точках. Полный гамильтониан 6-ти зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -метода может быть представлен в виде суммы 4-х слагаемых:

$$H = H_{vv} + H_{SO} + H_{st} + \Delta E_V^{GeSi} x(\mathbf{r}). \quad (2.8)$$

Здесь H_{vv} - часть гамильтониана связанная с кинетической энергией дырки, H_{SO} часть гамильтониана, описывающая подзону, отщепленную спин-орбитальным взаимодействием. H_{st} гамильтониан описывающий модификацию валентной зоны под влиянием деформаций. $\Delta E_V^{GeSi}(\mathbf{r})$ член, описывающий разрыв валентной зоны на гетерогранице Ge/Si. Рассмотрим более подробно составляющие части гамильтониана. В базисе блоховских волновых функций эти части гамильтониана имеют следующий вид [77]:

$$H_{vv} = \begin{pmatrix} [Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2)]\mathbf{I} & Nk_xk_y\mathbf{I} & Nk_xk_z\mathbf{I} \\ Nk_yk_x\mathbf{I} & [Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2)]\mathbf{I} & Nk_yk_z\mathbf{I} \\ Nk_zk_x\mathbf{I} & Nk_zk_y\mathbf{I} & [Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2)]\mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

$$H_{st} = \begin{pmatrix} [l\varepsilon_{xx} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})]\mathbf{I} & n\varepsilon_{xy}\mathbf{I} & n\varepsilon_{xz}\mathbf{I} \\ n\varepsilon_{xy}\mathbf{I} & [l\varepsilon_{yy} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz})]\mathbf{I} & n\varepsilon_{yz}\mathbf{I} \\ n\varepsilon_{xz}\mathbf{I} & n\varepsilon_{yz}\mathbf{I} & [l\varepsilon_{zz} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})]\mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

$$H_{SO} = \frac{\Delta_0}{3} [\hat{\sigma}_x \hat{J}_x + \hat{\sigma}_y \hat{J}_y + \hat{\sigma}_z \hat{J}_z - 1] = \frac{\Delta_0}{3} \begin{pmatrix} -\mathbf{I} & -i\hat{\sigma}_z & i\hat{\sigma}_y \\ i\hat{\sigma}_z & -\mathbf{I} & -i\hat{\sigma}_x \\ -i\hat{\sigma}_y & i\hat{\sigma}_x & \mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Здесь \mathbf{I} единичная матрица, размером 2×2 ; $\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla$ - оператор волнового вектора, $\varepsilon_{\alpha\beta}$ - тензор деформации. Величины L, M, N выражаются через параметры Латтинжера $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$:

$$L = -(\gamma_1 + 4\gamma_2) \cdot \frac{\hbar^2}{2m_0}, \quad (2.12)$$

$$M = -(\gamma_1 - 2\gamma_2) \cdot \frac{\hbar^2}{2m_0}, \quad (2.13)$$

$$N = -6\gamma_3 \cdot \frac{\hbar^2}{2m_0}, \quad (2.14)$$

m_0 - масса свободного электрона, \hbar - постоянная Планка, l, m, n - связаны с константами деформационного потенциала следующими соотношениями.

$$a_v = \frac{l + 2m}{3}, \quad (2.15)$$

$$b_v = \frac{l - m}{3}, \quad (2.16)$$

$$d = \frac{n}{\sqrt{3}}, \quad (2.17)$$

Δ_0 - величина спин-орбитального расщепления валентной зоны, $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ - матрицы, образующие трехмерное представление группы вращений; $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ - матрицы Паули. Параметры материалов, использованные при расчетах приведены в таблице 2.1.

Таблица 2.1. Параметры материалов, использованные в расчетах. Энергия спин-орбитального расщепления валентной зоны - Δ_0 , деформационные потенциалы - a_v , b_v , d , Ξ_d и Ξ_u (в эВ, см. [78]), параметры Латтинжера - γ_1 , γ_2 , γ_3 (см. [82])

Параметр	Si	Ge
γ_1	4.28	13.38
γ_2	0.34	4.24
γ_3	1.45	5.69
a_v	2.46	1.25
b_v	-2.1	-2.9
d	-4.8	-5.3
$\Xi_d + \frac{1}{3}\Xi_u - a_v$	1.72	1.31
Ξ_u	8.6	9.4
Δ_0	0.04	0.30

Для того, чтобы численно решить приведенные выше уравнения необходима дискретизация. В данной работе использовались дифференциальные схемы второго порядка точности на равномерной сетке [83]:

$$a \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_\alpha^2} = a \frac{1}{h^2} (\Psi(x_\alpha - h) - 2\Psi(x_\alpha) + \Psi(x_\alpha + h)) + O(h^2), \quad (2.18)$$

$$b \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} = b \frac{1}{4h^2} (\Psi(x_\alpha + h, x_\beta + h) - \Psi(x_\alpha + h, x_\beta - h) - \Psi(x_\alpha - h, x_\beta + h) + \Psi(x_\alpha - h, x_\beta - h)) + O(h^2). \quad (2.19)$$

Данные разностные схемы обеспечивают эрмитовость матрицы Гамильтона, если коэффициенты перед дифференциальными операторами (a , b) остаются неизменными во всем расчетном пространстве. В качестве таких коэффициентов выступают обратные эффективные массы в гамильтониане для электронов и коэффициенты L , M , N 6-ти зонного $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ метода для дырок. Поскольку эти коэффициенты терпят разрыв на гетерогранице Ge/Si то данная разностная схема не обеспечивает эрмитовости Гамильтониана. Для избежания этой проблемы для электронов и дырок брались постоянные коэффициенты. Для дырок использовались германиевые значения, так как дырка локализована преимущественно в Ge, а для электронов использовались кремниевые значения. Отдельно рассмотрим дискретизацию деформационной поправки к гамильтониану. Для вычисления поправки к гамильтониану в узле \mathbf{r}_j необходимо знать значение деформаций и волновой функции в том же самом узле. Поэтому разрывность деформационных потенциалов на гетерогранице не влияет на эрмитовость гамильтониана. Таким образом внутри нанокластера Ge использовались германиевые значения коэффициентов деформационного потенциала, а внутри Si кремниевые.

Для численного решения уравнения Шредингера использовался метод свободной релаксации, описанный в [84]. Любая волновая функция

$|\Phi(\mathbf{r})\rangle$ может быть разложена по собственным функциям гамильтониана ψ_i

$$|\Phi(\mathbf{r})\rangle = \sum_i c_i |\psi_i(\mathbf{r})\rangle. \quad (2.20)$$

Вместо решения стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (2.21)$$

Решается нестационарное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle, \quad (2.22)$$

в котором была сделана замена $t = i\tau$. Введение мнимого времени в уравнение Шредингера свело его к уравнению теплопроводности. С учетом зависимости от времени волновой функции в стационарном состоянии и введении мнимого времени разложение 2.20 может быть переписано в виде:

$$|\Phi(\mathbf{r}, \tau)\rangle = \sum_i c_i(\tau) \exp\left(-\frac{E_i\tau}{\hbar}\right) |\psi_i(\mathbf{r})\rangle, \quad (2.23)$$

при $\tau \rightarrow \infty$ все члены уравнения 2.23 стремятся к нулю кроме первого. Он стремится к единице из условия нормировки волновой функции $\sum_i |c_i|^2 = 1$. Таким образом при эволюции во времени произвольной начальной волновой функции произойдет релаксация этой волновой функции в основное состояние электрона или дырки. Если необходимо получить первое возбужденное состояние волновой функции то, начальную волновую функцию следует брать ортогональной к основному состоянию. Однако из-за ошибок вычисления процедуру ортогонализации следует повторять каждые несколько шагов. Таким образом алгоритм нахождения основного состояния состоит из следующих шагов:

1) Берем начальную нормированную волновую функцию (произвольную) $|\Psi_0\rangle$.

- 2) Вычисляем вспомогательную волновую функцию $|\Phi_n\rangle = \hat{H}|\Psi_n\rangle$.
- 3) Вычисляем новую ненормированную функцию $|\tilde{\Psi}_{n+1}\rangle = |\Psi_n\rangle + \tau|\Phi_n\rangle$.
- 4) Нормируем волновую функцию $|\Psi_{n+1}\rangle = \frac{|\tilde{\Psi}_{n+1}\rangle}{\|\tilde{\Psi}_{n+1}\rangle}$
- 5) Вычисляем норму “невязки” $\delta_n = \|\Psi_{n+1}\rangle - \hat{H}|\Psi_n\rangle|$. Если норма невязки превышает необходимую точность, то возвращаемся к шагу 2. В противном случае завершаем вычисления и определяем энергию связи частицы в данном состоянии $E_i = \langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle$.

При необходимости определить энергию связи и волновую функцию частицы в возбужденном состоянии повторяем все шаги, но волновую функцию берем ортогональной к волновой функции основного состояния и периодически ортогонализуем волновую рабочую волновую функцию к волновой функции основного состояния.

2.2.2 Многочастичные состояния дырок

В данной работе рассматриваются состояния двух дырок, локализованных в двойной квантовой точке, а так же электрона и дырки, локализованных в составе экситона. Многочастичные состояния дырок исследовались методом конфигурационного взаимодействия в сочетании с техникой определителей Слэйтера [75, 76]. Волновая функция двух тождественных невзаимодействующих фермионов должна быть антисимметричной по перестановке этих частиц. Пусть у нас имеется пара фермионов, которые могут находиться в состояниях с волновыми функциями ψ_1 и ψ_2 , а ξ_1 - координаты первой частицы, ξ_2 - второй. Таким образом полная волновая функция двухчастичного состояния $\psi(\xi_1, \xi_2)$ может быть записана как линейная комбинация произведений одночастичных волновых функций:

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \sum_{i,j=1}^2 C_{ij} \psi_i(\xi_1) \psi_j(\xi_2). \quad (2.24)$$

Для того, чтобы полная волновая функция двух частиц оказалась антисимметричной по перестановки этих частиц, выражение 2.24 должно иметь вид:

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) - \psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1)). \quad (2.25)$$

Обобщая на случай N фермионов выражение 2.25 может быть переписано в виде определителя:

$$\psi_{N_1 N_2 \dots} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \dots & \psi_1(\xi_n) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_2(\xi_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_N(\xi_1) & \psi_N(\xi_2) & \dots & \psi_N(\xi_n) \end{vmatrix}. \quad (2.26)$$

Данный определитель носит название определителя Слэйтера. Основное свойство определителя в том, что если имеются два фермиона находящиеся в одинаковом квантовом состоянии, то он равен нулю. Перестановка двух частиц в этом случае эквивалентна перестановке двух строк в определителе. Таким образом, волновая функция системы из N фермионов автоматически удовлетворяет принципу Паули.

Гамильтониан двух взаимодействующих фермионов может быть записан в виде:

$$\hat{H} = \sum_i E_i \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{i\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma, \sigma'} \Gamma_{kl}^{ij} \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{j\sigma'}^\dagger \psi_{k\sigma'} \psi_{l\sigma}, \quad (2.27)$$

здесь E_i - одночастичная энергия фермиона на уровне i , $\psi_{i\sigma}$ - волновая функция фермиона на i -ом уровне энергии с эффективным спином σ .

$$\Gamma_{kl}^{ij} = \int \int \frac{\psi_{i\sigma}^*(\mathbf{r}) \psi_{j\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') \psi_{k\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{l\sigma}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'}{\epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.28)$$

где ϵ - диэлектрическая проницаемость материала, равная полусумме диэлектрических проницаемостей Si и Ge. Интегралы $V_{ij} = \Gamma_{ji}^{ij}$ описывают кулоновское взаимодействие фермионов в состояниях i и j , а

интегралы $K_{ij} = \Gamma_{ij}^{ij}$ - обменное. Оставшиеся интегралы описывающие взаимодействие конфигураций (scattering term). В рамках метода конфигурационного взаимодействия гамильтониан 2.27 диагонализуются в базисе определителей Слэйтера. Полная волновая функция системы из двух фермионов представляет собой линейную комбинацию определителей Слэйтера $\Psi = A_C |\Phi_C\rangle$. Где A_C - “вес” определителя $|\Phi_C\rangle$. В данной работе мы рассматривали только два одночастичных состояния дырки σ_g и σ_u . В этом случае определители Слэйтера, образующие базис разложения, выражаются следующим образом: $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$, $|\sigma_u^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle$, $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_u^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$, $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle + |\sigma_u^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$, $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\uparrow\rangle$, $|\sigma_g^\downarrow; \sigma_u^\downarrow\rangle$. Более возбужденные молекулярные орбитали были исключены из рассмотрения. В работах [75, 76] было продемонстрировано, что исключив из рассмотрения одночастичные π орбитали, удастся получить корректное описание основного и первого возбужденного двухчастичных электронных состояний в структуре с двумя вертикально совмещенными квантовыми точками InAs/GaAs. В данной работе этот подход был распространен на дырочную подсистему квантовых точек Ge/Si. Из-за сильно спин-орбитально взаимодействия двухчастичное состояние дырки не может рассматриваться как спиновый синглет или спиновый триплет. Однако если в качестве эффективного спина взять знак проекции полного момента J на ось симметрии структуры, то спектр двух дырок, локализованных в двойной квантовой точке можно рассматривать как псевдоспиновый синглет и псевдоспиновый триплет.

Для исследования таких величин как вероятность двойного заполнения квантовой точки двумя электронами или дырками необходимо перейти от базиса молекулярных орбиталей σ_g и σ_u к базису орбиталей, локализованных на верхней σ_T или нижней σ_B квантовых точках. Такой переход может быть совершен с помощью унитарного преобразования.

$$\phi_\eta = \sum_i U_{\eta i} \psi_i, \quad (2.29)$$

где ψ_i - молекулярная орбиталь, а ϕ_η - орбиталь локализованная на точке. Матрица преобразования U выбирается с таким расчетом, чтобы максимизировать кулоновскую энергию взаимодействия частиц, находящихся на одной точке (но с разным направлением эффективного спина). Интегралы метода конфигурационного взаимодействия в новом базисе могут быть записаны как:

$$\tilde{\Gamma}_{\eta_3\eta_4}^{\eta_1\eta_2} = \sum_{i,j,k,l} U_{\eta_1 i}^* U_{\eta_2 j}^* U_{\eta_3 k} U_{\eta_4 l} \Gamma_{kl}^{ij}, \quad (2.30)$$

таким образом кулоновская энергия взаимодействия частиц, находящихся на одной точке может быть записана следующим образом:

$$U_{tot} = \sum_{\eta} \tilde{\Gamma}_{\eta\eta}^{\eta\eta} = \sum_{\eta} \sum_{i,j,k,l} U_{\eta i}^* U_{\eta j}^* U_{\eta k} U_{\eta l} \Gamma_{kl}^{ij}. \quad (2.31)$$

Процедура максимизации U_{tot} аналогична процедуре, описанной [85], где по различным критериям строились максимально локализованные функции Ванье. На первом шаге полагаем $U = I$, где I - единичная матрица. Далее построим матрицу $\tilde{U} = \exp(\delta\epsilon)$, где $\delta\epsilon$ антиэрмитова матрица. Можно показать, что матрица

$$\delta\epsilon_{ij} = -\kappa(\Gamma_{ij}^{jj} + \Gamma_{ji}^{jj} - \Gamma_{ij}^{ii} - \Gamma_{ji}^{ii}), \quad (2.32)$$

обладает всеми нужными свойствами ($\delta\epsilon_{ij} = -\delta\epsilon_{ji}^*$). κ - малое вещественное число. В этом случае в первом порядке аппроксимации $\delta U_{tot} = |\delta\epsilon| \geq 0$, то есть такая процедура увеличивает кулоновскую энергию. Матрица U_{n+1} очередной итерации строится следующим образом $U_{n+1} = U_n \cdot \tilde{U}$. После этого пересчитываются все интегралы метода конфигурационного взаимодействия и процедура повторяется до локализации волновых функций дырок на верхней или нижней точке.

2.3 Метод спектроскопии адмитанса

По аналогии с глубокими уровнями в полупроводниках [30,31] принцип спектроскопии адмитанса структур с квантовыми точками осно-

ван на измерении комплексной проводимости системы, возникающей при перезарядке КТ вследствие эмиссии носителей заряда из КТ в разрешенные зоны и их обратного захвата на связанные состояния в КТ.

Рассмотрим зонную диаграмму барьера Шоттки на n -Si, в область пространственного заряда которого встроены квантовые точки Ge (рис. 2.1). При изменении обратного смещения U_b энергетические уровни электронов в КТ смещаются относительно уровня Ферми E_F в слое n^+ -Si, что приводит к изменению фактора заполнения точек электронами. Переменная составляющая приложенного к диоду напряжения в течении первого полупериода стимулирует эмиссию электронов с уровней, находящихся вблизи E_F , в зону проводимости Si, а в течении второго полупериода – захват дырок на связанные состояния в КТ. Согласно принципа детального равновесия, темп термической эмиссии дается выражением [30, 31]

$$e_n(T) = (1/g_t)\sigma_n(T)\langle v_{th} \rangle N_c \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right), \quad (2.33)$$

где g_t - фактор вырождения, σ_n - эффективное сечение захвата электронов в КТ, $\langle v_{th} \rangle$ - средняя тепловая скорость электронов, N_c - эффективная плотность состояний в зоне проводимости Si, E_i - уровень энергии электрона в КТ Ge, отсчитанный от дна зоны проводимости Si, k_B - постоянная Больцмана, T - температура. В эксперименте измеряется зависимость проводимости G от температуры при фиксированной величине U_b и частоты зондирующего переменного напряжения f . Динамическая проводимость, связанная с перезарядкой КТ, должна иметь максимальное значение при температуре T_m , удовлетворяющей условию [86]

$$e_n(T_m) \simeq \omega/2, \quad (2.34)$$

где $\omega = 2\pi f$. В области меньших температур, когда $e_n(T) \ll \omega$ элек-

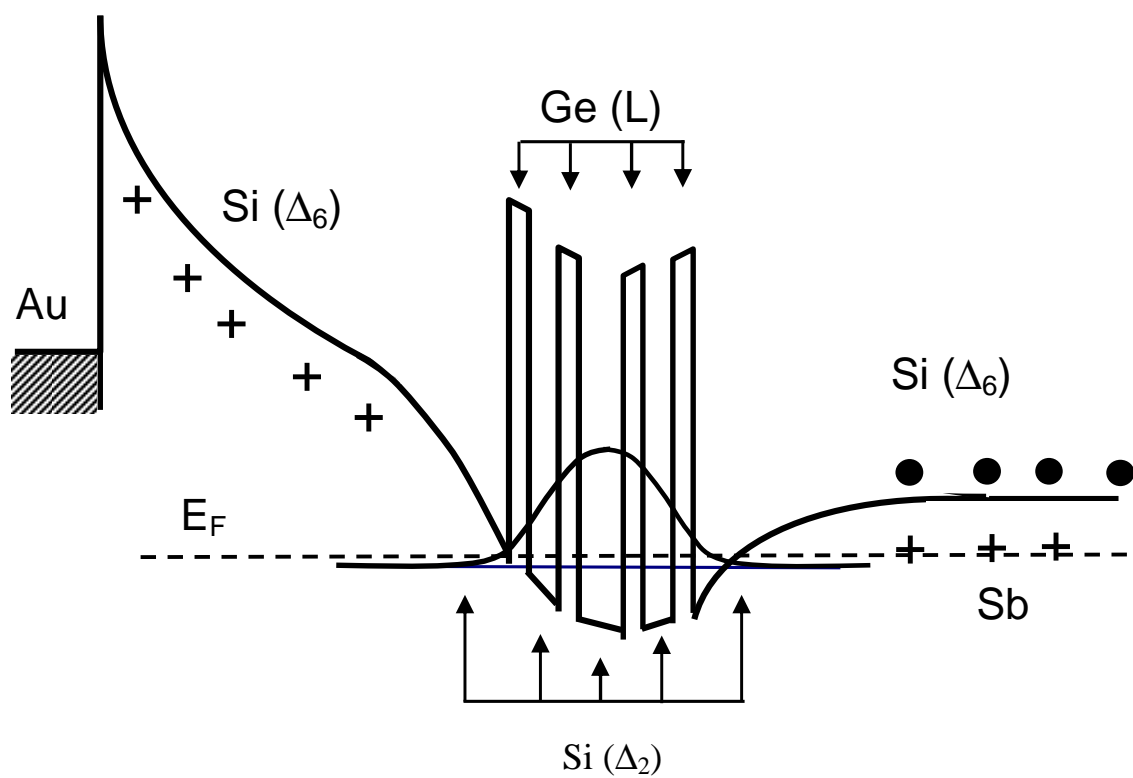


Рис. 2.1. Зонная диаграмма барьеров Шоттки со встроенными в область пространственного заряда 4 слоями квантовых точек

троны “заморожены” на уровнях квантовых точек, поэтому проводимость мала. При больших температурах соответствующие электронные уровни опустошены и не принимают участие в проводимости, поэтому G опять стремиться к нулю. Определив в эксперименте T_m при разных фиксированных частотах ω , мы можем найти температурную зависимость скорости термоэмиссии $e_n(T_m)$, а затем, строя зависимости $\ln(e_n)$ от T_m^{-1} , согласно выражению (2.33), определить энергию активации E_a .

Для измерения температурной зависимости проводимости применялась установка, состоящая из держателя образца, снабженного термосопротивлением, а так же приборной части. Держатель с образцом медленно опускался в дьюар с жидким гелием. Время, необходимое для охлаждения образца от 300 К до 4.2 К, составляло примерно 2–3 часа. Сопротивление термодатчика измерялось по четырехточечной схеме вольтметром В7-39, данные с которого поступали на персональный компьютер (ПК). Температура определялась по известным калибровочным формулам, связывающим сопротивление датчика и его температуру. Измерения комплексной проводимости осуществлялись с помощью моста Fluke PM6306 RCL Meter в диапазоне частот 10–1000 кГц и температур 4.2–300 К. Амплитуда переменной составляющей приложенного напряжения составляла 50 мВ.

Погрешность измерения температурной зависимости проводимости и емкости складывалась из погрешности измерения температуры и погрешности измерения проводимости.

Приборная погрешность измерения емкости и проводимости составила 10%. В дальнейшем данные поступали в ЭВМ, где и обрабатывались.

Погрешность измерения температуры определялась двумя факторами: погрешностью термодатчика и дрейфом температуры в процессе измерения. Погрешность используемого термодатчика не хуже 0.1

К. Дрейф температуры в процессе измерения может быть оценен по разности температуры в двух последовательных измерениях. Проведенные оценки показывают, что температурный дрейф в диапазоне температур ниже 77 К составляет не более 0.3 К.

Глава 3

Электронные состояния в многослойных гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками

3.1 Локализация электронов в гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками Ge

3.1.1 Расчет деформаций

В гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками Ge могут локализоваться носители заряда только одного знака - дырки. Однако квантовая точка, захватившая дырку, заряжается положительно. В результате этого формируется потенциал, в котором возможна локализация электронов. Общепринятым считается, что локализация электронов в Ge КТ возможна только вблизи заряженной квантовой точки.

Существенным фактором, приводящим к модификации структуры энергетических зон и совершенно не рассмотренным в приведенной выше картине, является неоднородное распределение упругих деформаций, неизбежно сопровождающее формирование самоорганизующихся квантовых точек в процессе эпитаксии упруго напряженных гетеросистем. Неоднородные деформации вблизи квантовой точки приводят к тому, что энергия шести Δ -долин в Si, которые образуют зону прово-

димости, изменяется. При этом две Δ -долины, ориентированные перпендикулярно плоскости квантовой точки, понижают свою энергию, а четыре Δ -долины, ориентированные в плоскости квантовой точки, повышают свою энергию [рис. 3.1(а)]. В результате понижения энергии Δ -долин формируется потенциальная яма, в которой может появиться связанное состояние электрона. Впервые на этот факт было указано в работах [2] и [87]. В работе [2] была рассчитана энергия основного состояния электрона в квантовой яме вблизи вершины пирамиды Ge, которая составила 7 мэВ. В работе [87] производился расчет изменения энергии дна зоны проводимости и потолка валентной зоны для квантовых точек большого размера (~ 80 нм в основании) как для одиночной квантовой точки, так и для многослойной структуры состоящей из 5 вертикально упорядоченных квантовых точек.

В однослойных структурах величина деформации и размер потенциальной ямы для электронов малы, поэтому энергия связи электрона в такой структуре не превышает 10 мэВ. В многослойных структурах с вертикальным совмещением нанокластеров Ge дальнедействующие поля упругих напряжений накапливаются в направлении роста и формируют потенциальные ямы для электронов, в которых возможно появление локализованных электронных состояний с энергией связи превышающей тепловую энергию электрона при комнатной температуре (~ 26 мэВ). В данной главе рассмотрены результаты моделирования энергетического спектра электронов в многослойной структуре, содержащей 4 слоя квантовых точек Ge с вертикальным совмещением. Основные усилия были сосредоточены на 1) поиске локализованных состояний в многослойных напряженных гетероструктурах Ge/Si и выявлении условий их существования; 2) определении энергии локализации электронов в двух отщепленных Δ -долинах в зоне проводимости Si в зависимости от состава нанокластеров Ge; 3) выявлении электронной конфигурации и пространственного распределения вол-

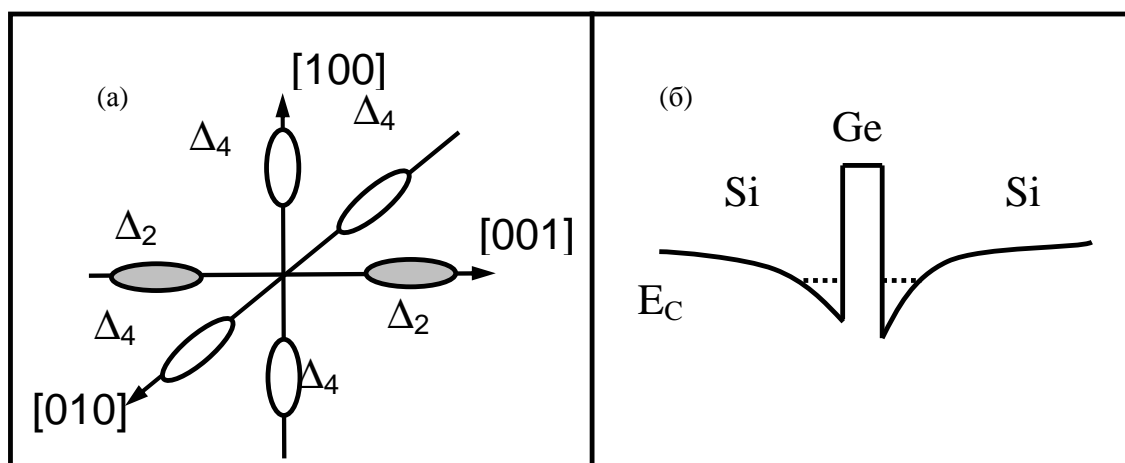


Рис. 3.1. (а) Изображение поверхности Ферми в Si. Δ -долины, закрашенные серым понижают свою энергию; (б) Схематическое изображение дна зоны проводимости вблизи КТ Ge. Штриховой линией схематично показана энергия связанного состояния электрона вблизи КТ.

новых функций электронов в кремнии.

Структура с вертикально совмещенными квантовыми точками моделировалась колонкой из четырех нанокластеров $\text{Ge}_c\text{Si}_{1-c}$, расположенных один над другим в направлении роста структуры z и разделенных прослойками Si (рис.3.2). Каждый нанокластер имел форму усеченной пирамиды с ориентацией основания вдоль направлений $[100]$ (x) и $[010]$ (y). Длина основания пирамиды составляла 23 нм, высота 1.5 нм. Каждая пирамида располагалась на тонком (4.5 монослоя) смачивающем слое $\text{Ge}_c\text{Si}_{1-c}$. Расстояние между первой и второй КТ, также как между третьей и четвертой КТ составляло 3 нм, между второй и третьей – 5 нм. Область кристалла, вовлеченная в вычислительный процесс при расчете деформаций для одиночной КТ (нанокластер Ge и окружающая матрица Si), имела форму прямоугольного параллелепипеда и типичные размеры $50a \times 50a \times 50a$ вдоль направлений x , y и z соответственно. Здесь $a = 5.431 \text{ \AA}$ -постоянная решетки Si. Для того, чтобы сократить компьютерные ресурсы, необходимые для вычислений, использовался принцип подобия: деформации рассчитывались для квантовой точки с размером основания 15 нм, а затем все линейные размеры структуры увеличивались в 1.5 раза, чтобы получить необходимые размер КТ.

Деформации многослойной структуры получались алгебраическим сложением деформаций от каждой точки с учетом их взаимного расположения в пространстве. При таком подходе величина деформации оказывается завышенной не более, чем на 10% [87]. Важной проблемой, требующей дополнительного внимания, являлась размер области, внутри которой вычисляются деформации: слишком маленькая область даст неточный результат, слишком большая потребует огромных затрат машинного времени. Для того, чтобы убедиться в правильности получаемых результатов, нами были найдены компоненты тензора деформации в областях кристалла с различными размерами

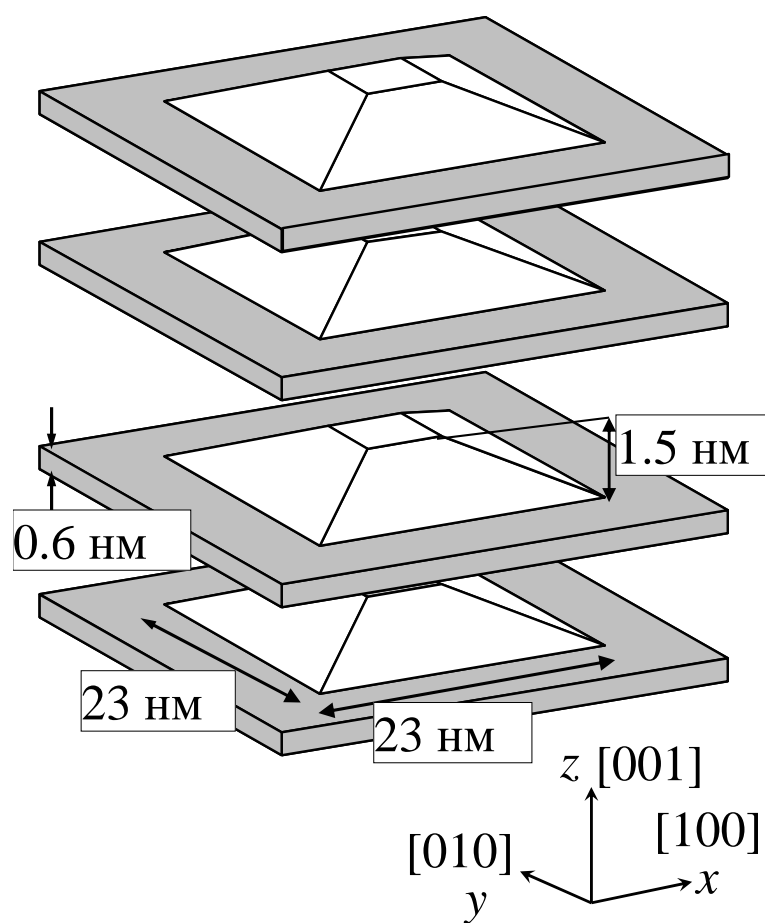


Рис. 3.2. Схематическое изображение колонки, состоящего из четырех нанокластеров $\text{Ge}_c\text{Si}_{1-c}$, расположенных один над другим в направлении роста структуры z и разделенных прослойками Si .

областей: $32a \times 32a \times 32a$, $32a \times 32a \times 50a$ и $50a \times 50a \times 50a$. Оказалось, что распределение деформаций не зависит от размера “ящика” с точностью до 5%.

На рис.3.3 приведены профили компонент тензора деформации многослойной структуры $\text{Ge}_{0.7}\text{Si}_{0.3}$ вдоль вертикальной оси z и горизонтальной оси x , проходящих через центр симметрии колонки, состоящего из четырех вертикально совмещенных островков GeSi (рис.3.2). Положительные значения компонент тензора напряжений соответствуют растяжению кристалла, отрицательные – сжатию. Из рисунка видно, что слой Si под и над КТ Ge растянут в плоскости xy . В латеральном направлении деформации затухают на расстоянии порядка диаметра нанокластера Ge. В вертикальном направлении механические напряжения релаксируют на расстоянии порядка 15 нм.

3.1.2 Профиль дна зоны проводимости

Перейдем к рассмотрению распределения потенциальной энергии электрона. Потенциальная энергия электрона в зоне проводимости напряженной гетероструктуры может быть записана в виде выражения 2.6 Разрыв зон между Si и $\text{Ge}_c\text{Si}_{1-c}$ для случая $c = 1$ известен и равен 0.34 эВ [78]. Однако поскольку величина ΔE_c не является линейной функцией состава, ее определение для $c < 1$ требует дополнительного комментария. Для произвольного элементного состава Ge значение ΔE_c может быть найдено из соотношения

$$\Delta E_c^{\text{GeSi}} = E_g^{\text{GeSi}} + \Delta E_V^{\text{GeSi}} - E_g^{\text{Si}}, \quad (3.1)$$

где E_g^{Si} -ширина запрещенной зоны Si, E_g^{GeSi} -ширина запрещенной зоны твердого раствора $\text{Ge}_c\text{Si}_{1-c}$, ΔE_V^{GeSi} -разрыв валентной зоны. Линейная связь между составом Ge и разрывом валентной зоны в гетероструктурах Ge/Si была обоснована в работах [88, 89]. Различные теоретические и экспериментальные исследования показали, что раз-

рыв валентной зоны для чистого Ge на Si составляет величину вблизи 0.7 эВ [89–91]. Поэтому

$$\Delta E_v = 0.7 \times c \text{ [эВ]}. \quad (3.2)$$

Weber и Alonso [92] с помощью спектроскопии фотолюминисценции получили, что величина запрещенной зоны для ненапряженных $\text{Ge}_c\text{Si}_{1-c}$ в Δ -долине при температуре 4.2 К может быть аппроксимирована формулой

$$E_g^{\text{GeSi}} = 1.155 - 0.43c + 0.206c^2 \text{ [эВ]}. \quad (3.3)$$

Тогда из выражений (3.1), (3.2), (3.3) находим $\Delta E_c = 0.29$ эВ для $c = 0.7$. На рис.3.3 показаны соответствующие профили дна зоны проводимости вдоль тех же направлений z и x . Важным результатом здесь является то, что глубина потенциальной ямы, сформированная отщепленными вниз по энергии Δ_2 -долинами, в плоскости xy достигает значения порядка 100 мэВ. Поскольку эта яма мельче той, которая формируется в вертикальном направлении (в направлении z), то именно глубина потенциальной ямы в латеральном направлении и определяет энергию связи электронов.

Важным вопросом, требующим отдельного рассмотрения, является перекрытие напряжений от соседних квантовых точек в латеральном направлении. При таком перекрытии возможно сильное искажение потенциальной энергии электронов в плоскости структуры, в том числе и образование двумерных состояний, делокализованных в латеральном направлении.

Типичная концентрация квантовых точек составляет 10^{11} см^{-2} , что соответствует среднему расстоянию между точками в 30 нм. Для случая двух колонок КТ, разделенных 30 нм кремния, были рассчитаны распределения деформаций и потенциала в латеральном направлении. Результаты расчетов приведены на рис. 3.4. Из рисунка видно, что перекрытие несущественно: в плоскости структуры формируются две квантовые ямы, разделенные явным потенциальным барьером.

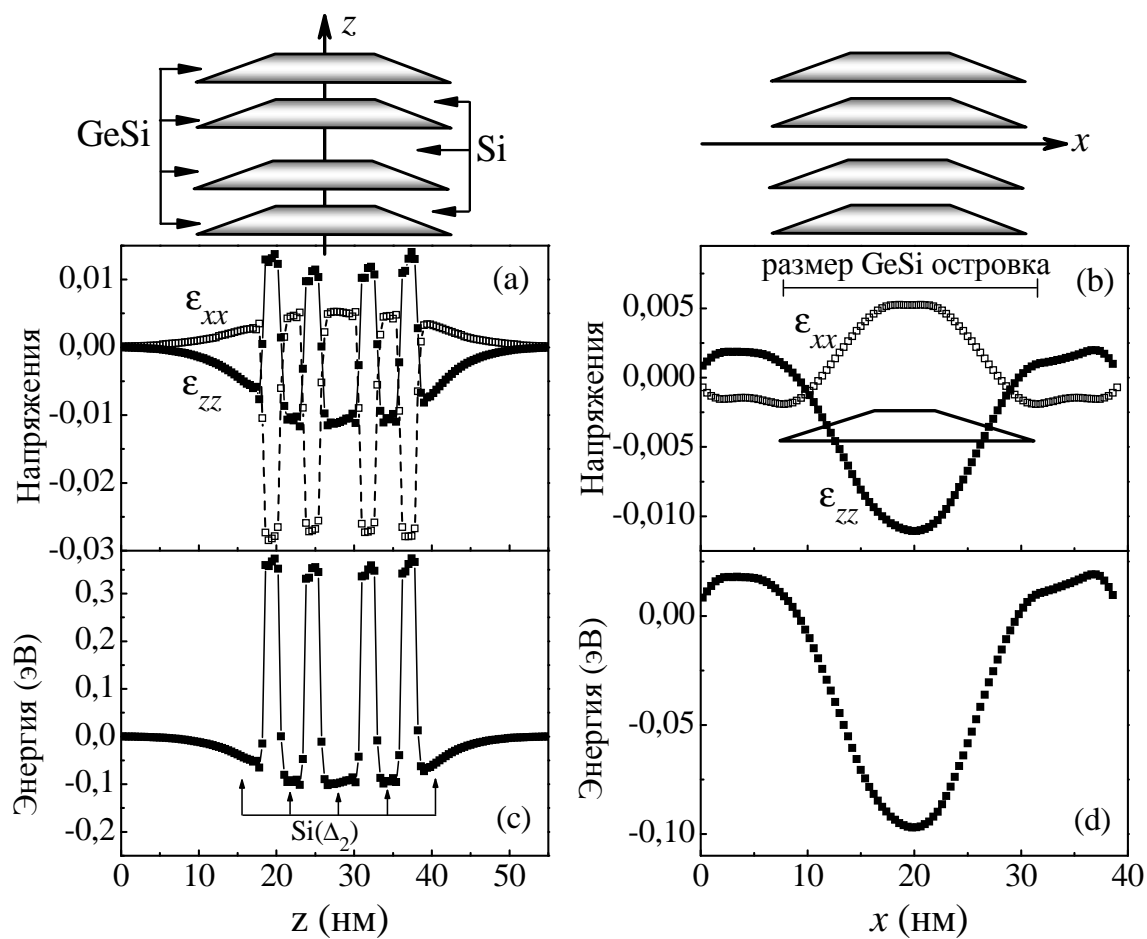


Рис. 3.3. Профили компонент тензора напряжений (a), (b) и дна зоны проводимости (c), (d) вдоль осей z и x , проходящих через центр симметрии колонки, состоящего из четырех нанокластеров $\text{Ge}_c\text{Si}_{1-c}$ ($c = 0.7$).

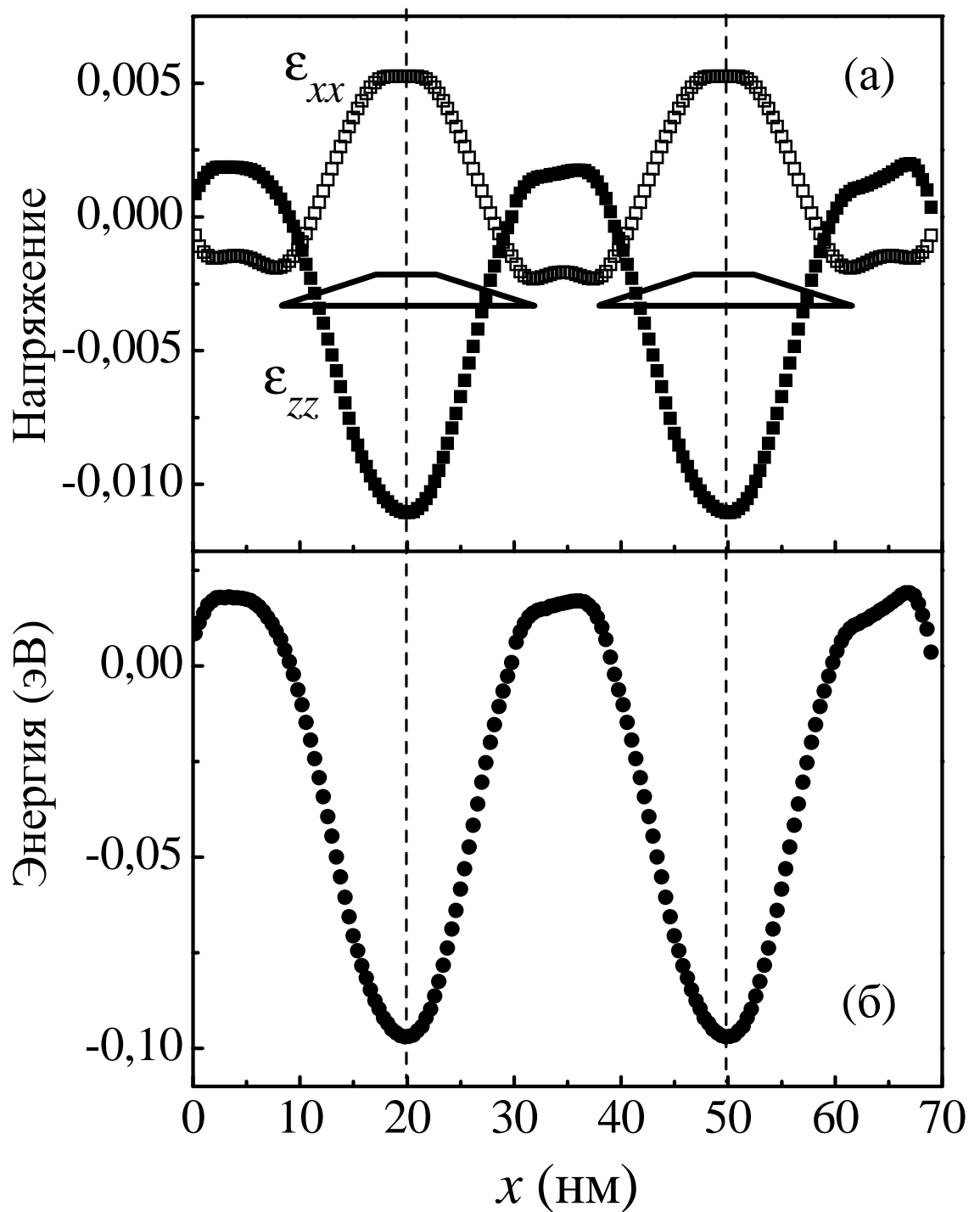


Рис. 3.4. (а) zz и xx компоненты тензора напряжений для двух колонок КТ Ge, находящихся на расстоянии 30 нм в плоскости структуры; (б) связывающий потенциал для электронов. Оба профиля показаны вдоль оси x .

3.1.3 Энергии и волновые функций связанных электронных состояний

Энергии связи электрона E_i и пространственная конфигурация электронных волновых функций находились на основе численного решения трехмерного уравнения Шредингера в приближении эффективной массы:

$$\left(\frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m_{xy}^*} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m_z^*} \right) \psi + U_e \psi = E \psi, \quad (3.4)$$

где потенциал $U_e = U_e(\mathbf{r})$ [см. выражение(2.6)]. Значения продольной и поперечной массы электрона в Δ -долинах Si выбирались как $m_{xy}^* = 0.19m_0$ и $m_z^* = 0.92m_0$, где m_0 -масса свободного электрона. Размер области пространства в процессе вычислительного эксперимента составлял $98b \times 98b \times 120b$, где b –0.75 от постоянной решетки объемного Si.

На рис.3.5 представлено пространственное распределение плотности электронного заряда для первых шести связанных состояний. Значение энергии связи электронов E_i ($i = 1, \dots, 6$) для этих же состояний показано на рис.3.6. Поверхность волновых функций выбиралась равной $|\psi_{max}|/e$, где $|\psi_{max}|$ -максимальное значение волновой функции, e -основание натурального логарифма. При таком выборе внутри изображенной поверхности $|\psi|^2$ сосредоточено приблизительно 75% электронного заряда. Из рисунка видно, что три состояния с наименьшими энергиями электрона имеют s -образную симметрию, в то время как следующие три состояния характеризуются p -образной симметрией и ориентированы вдоль направлений $[001]$, $[110]$ и $[\bar{1}10]$. Радиус локализации электрона имеет величину около 10 нм, что намного превышает радиус локализации дырки внутри островков Ge (2– 3 нм) [93]. Энергия связи для первых 6-ти уровней показаны на рис. 3.6

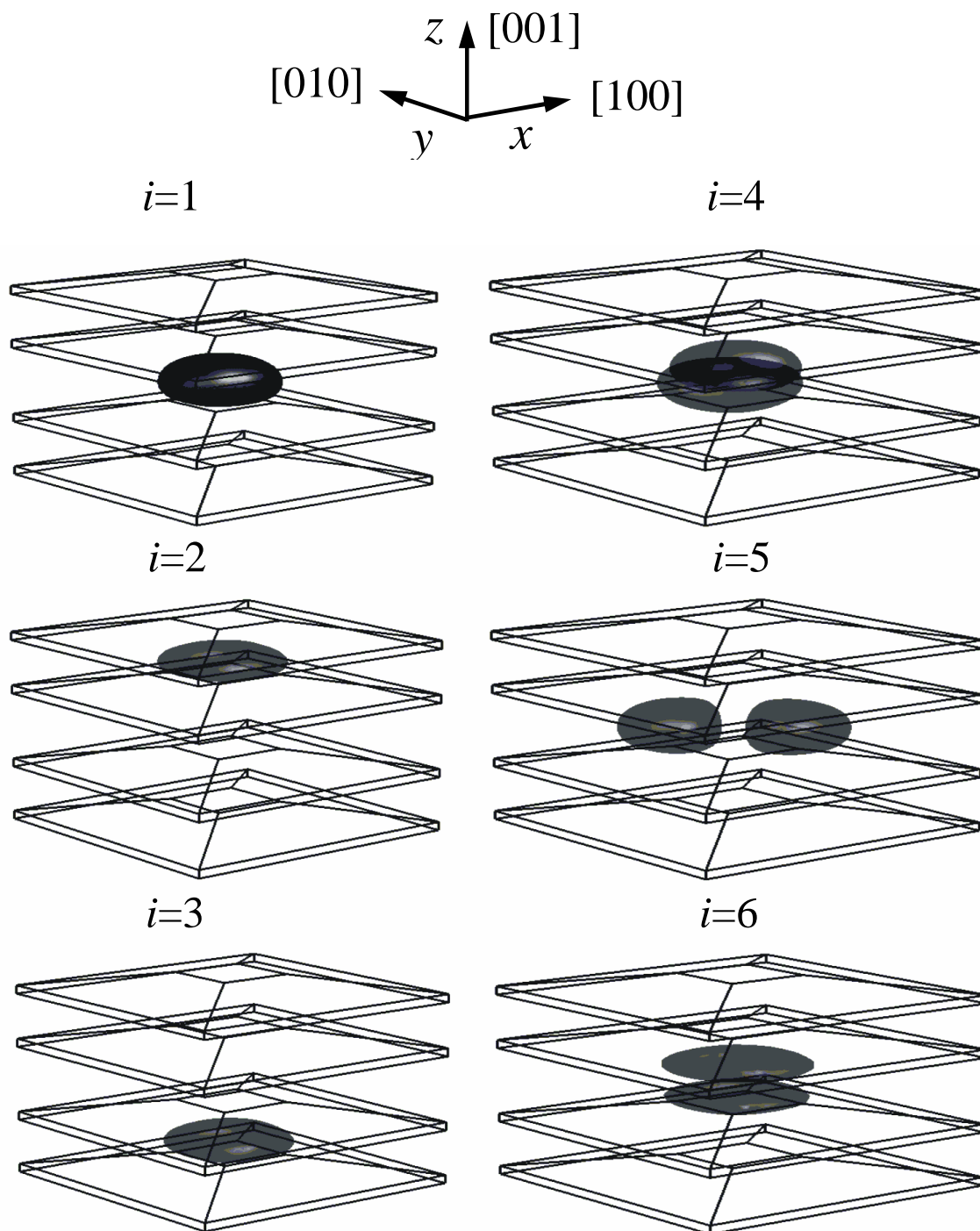


Рис. 3.5. Пространственное распределение плотности электронного заряда для первых шести связанных состояний. Индекс i нумерует электронные состояния. Поверхность волновых функций выбиралась равной $|\psi_{max}|/e$, где $|\psi_{max}|$ – максимальное значение волновой функции, e – основание натурального логарифма. При таком выборе внутри изображенной поверхности $|\psi|^2$ сосредоточено приблизительно 75% электронного заряда.

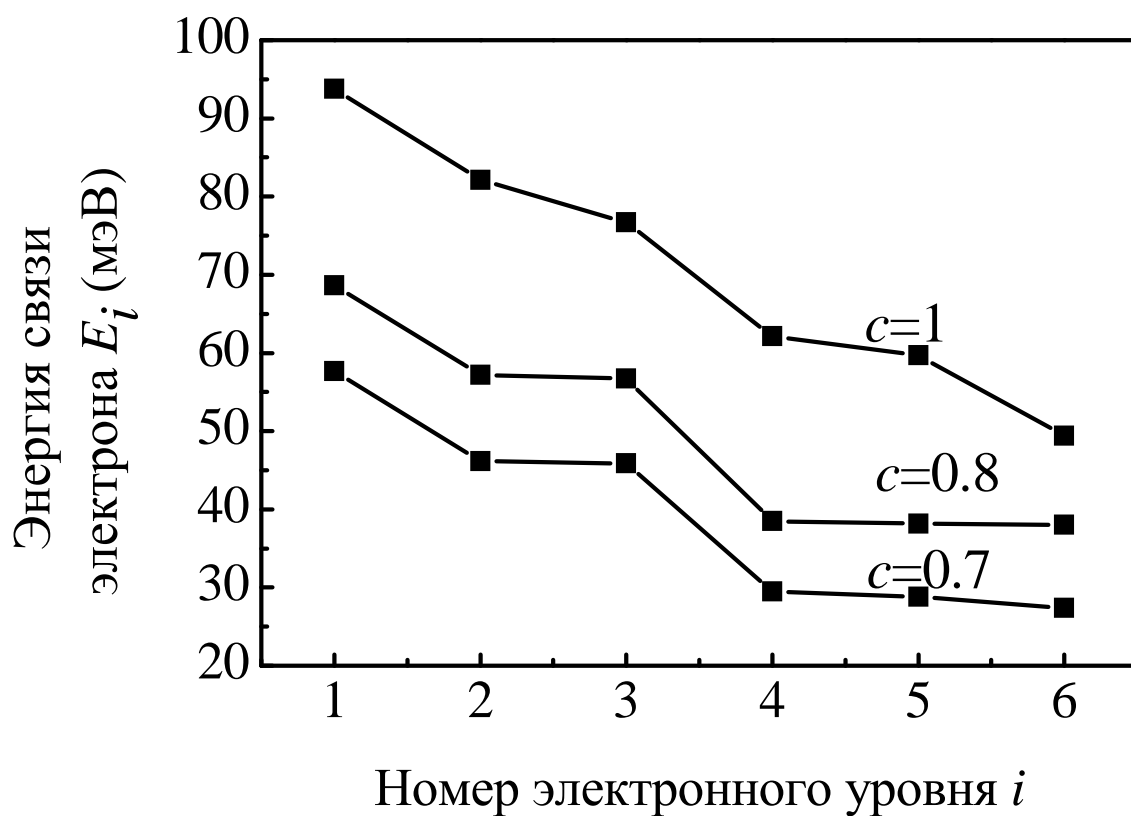


Рис. 3.6. Энергия связи электронов E_i ($i = 1, \dots, 6$) для первых шести связанных состояний и составов Ge в нанокластерах, для составов $c=0.7$, $c=0.8$, $c=1$

3.2 Спектроскопия адмитанса диодов Шоттки со встроенными слоями квантовых точек Ge

Для экспериментального подтверждения результатов моделирования была проведена спектроскопия адмитанса диодов Шоттки, со встроенными слоями квантовых точек Ge/Si. Измерения проводились для двух типов образцов. Образцы первого типа не содержали Ge. Они использовались в качестве контрольных. Образцы второго типа содержали 4 слоя квантовых точек, сопряженных в направлении роста. Расстояние между слоями составляло 3-5-3 нм.

Схема структур, с которыми проводились опыты, приведена на рис.3.7. Образцы выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии на установке типа “Катунь”, разработанной в ИФП СО РАН. В качестве подложек использовались пластины Si с ориентацией (001) и удельным сопротивлением 0.003 Ом·см, легированных мышьяком до концентрации $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Перед загрузкой в эпитаксиальную камеру подложки проходили процесс обезжиривания в ацетоне и нанесения поверхностного окисла толщиной $\sim 10 \text{ \AA}$ путем травления в растворе $\text{H}_2\text{O}_2:\text{HNO}_3:\text{H}_2\text{O}$. После загрузки в эпитаксиальную камеру пластины нагревались до температуры 800°C и выдерживались в потоке кремния $\sim 10^{13} \text{ ат}/(\text{см}^2\text{с})$ в течение трех минут. Чистота поверхности контролировалась при помощи дифракции быстрых электронов. Пройдя предэпитаксиальную обработку, подложки перегружались в ростовую камеру.

Температура роста всей структуры составляла 500°C . Четыре слоя Ge с толщиной покрытия, уменьшающейся от 5.6 МС в первом слое до 3.4 МС в четвертом, вводились внутрь слоя *n*-Si (концентрация донорной примеси Sb в слое $\sim 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, толщина слоя 0.8 мкм) на расстоянии 0.5 мкм от подложки. Скорость осаждения Ge– 1 МС/мин. Толщина прослоек Si между первым и вторым, третьим и четвертым

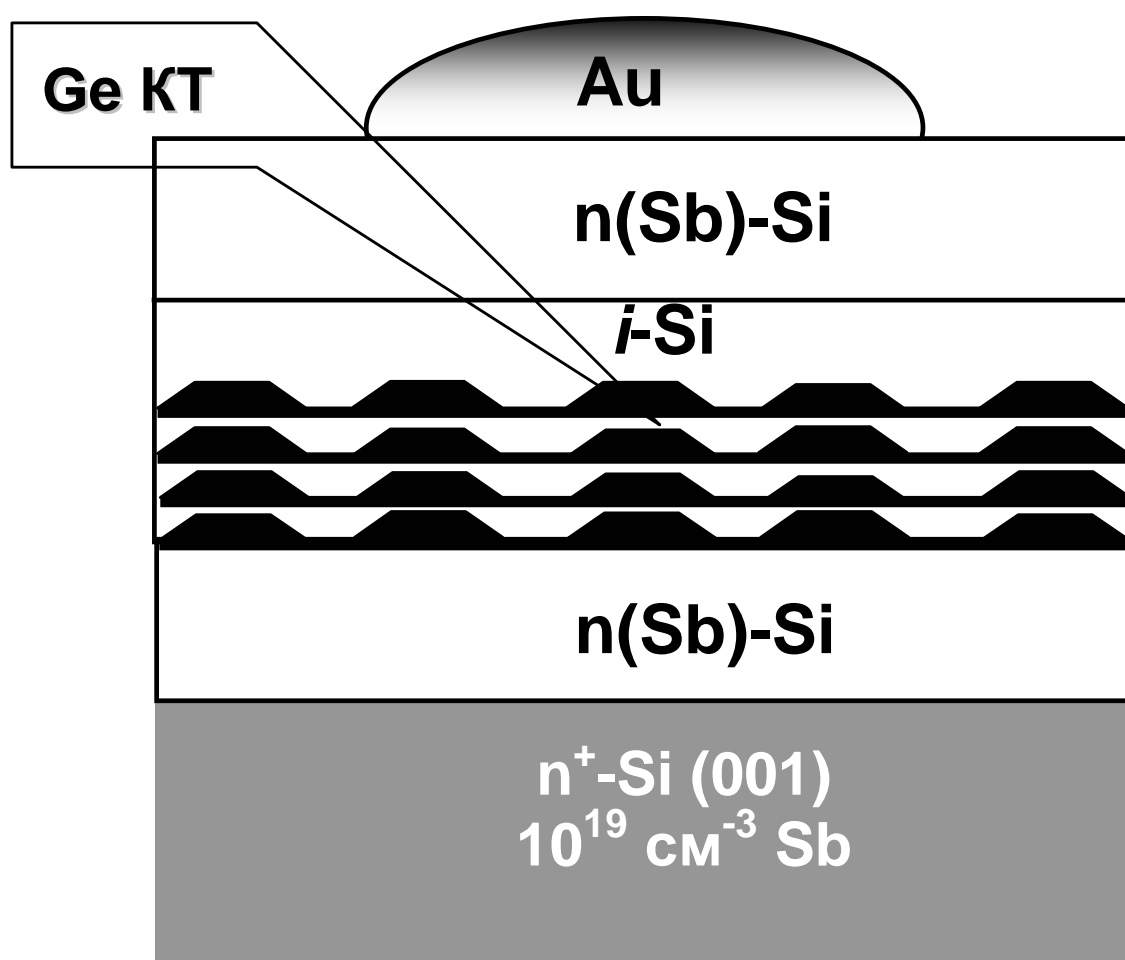


Рис. 3.7. Схематическое изображение структуры для измерения проводимости на переменном токе.

слоями Ge составляла 3 нм, между вторым и третьим – 5 нм. Контроль структуры с помощью дифракции быстрых электронов показал, что критическая толщина осажденного Ge, при которой происходил переход от двумерно-слоевого роста к трехмерному, уменьшается для каждого последующего германиевого слоя в эшелоне. Это обстоятельство является свидетельством влияния полей упругих напряжений на формирование островков Ge. Для того чтобы уменьшить искажение связывающего электроны в КТ потенциала потенциалом ионизированной примеси Sb в Si, между последним слоем Ge и верхним покрывающим слоем *n*-Si вводился нелегированный кремниевый спейсер толщиной 10 нм.

Исследования структуры с помощью сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) для одного слоя Ge, не закрытого Si, показали, что островки Ge имеют форму “hut” -кластеров, средние размеры основания которых в плоскости роста составляли примерно $20 \times 25 \text{ нм}^2$ при отношении высоты к длине основания 1:10 (рис. 3.8). Слоевая плотность нанокластеров Ge $\sim 1 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Изображение поперечного сечения образца, полученное с помощью высокоразрешающей электронной микроскопии и демонстрирующее вертикальное упорядочение в расположении островков Ge приведено на рис.3.9. Формирование диодов Шоттки завершалось напылением в вакууме пленки Au на поверхность образцов. Площадь золотого контакта составляла $7.5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2$. Наряду с образцом, содержащим КТ Ge, был выращен контрольный образец, в котором слои Ge отсутствовали.

На рис. 3.10 представлены вольт-фарадные (C-V) характеристики контрольного образца и образца с квантовыми точками Ge. Зависимость емкости от обратного смещения для образца, не содержащего Ge, не обладает никакими особенностями и имеет вид обычной C-V характеристики для контакта Шоттки с полупроводником *n*-типа. Зависимости емкости (C-T) и нормированной на частоту $\omega = 2\pi f$ про-

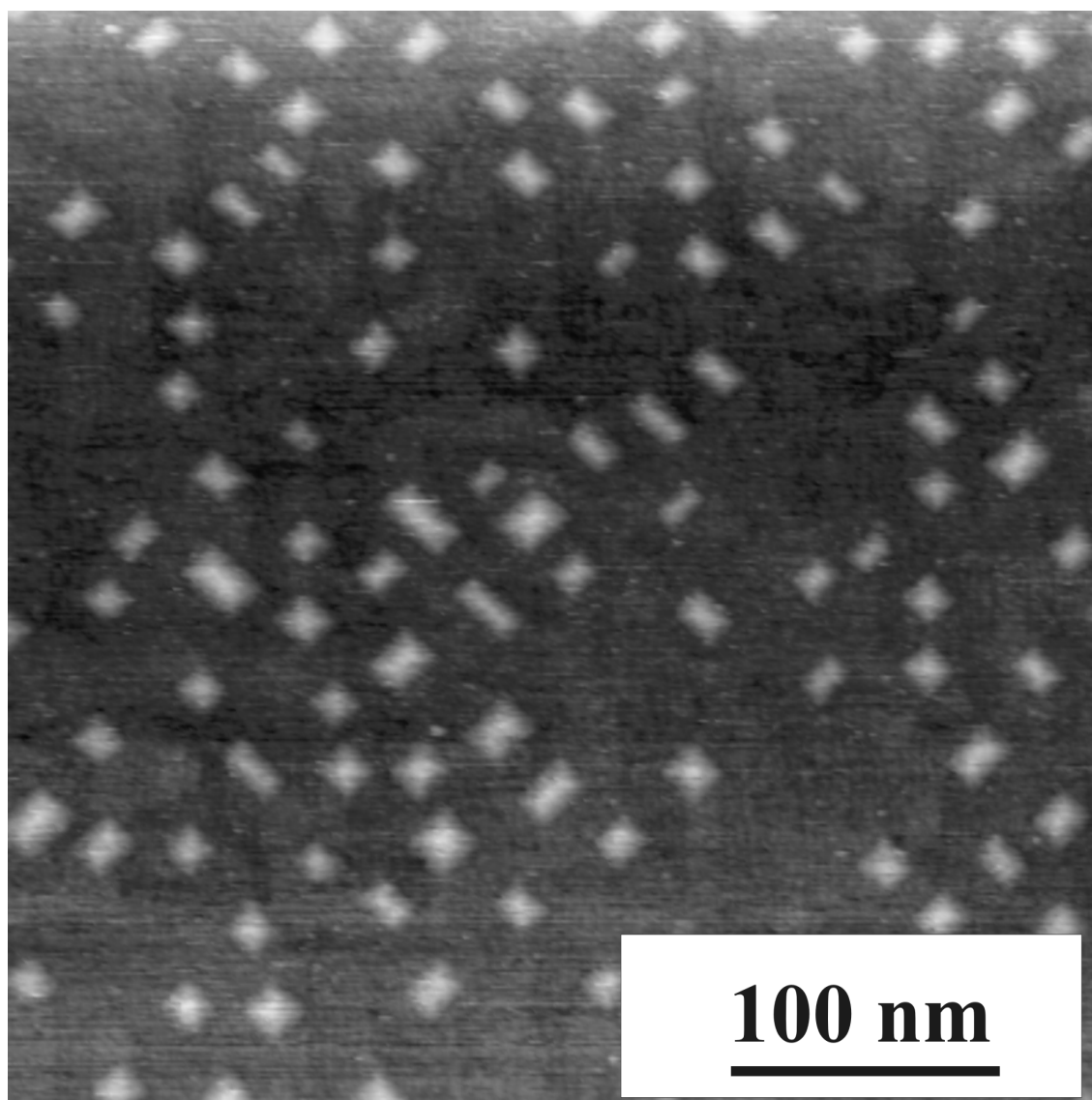


Рис. 3.8. СТМ изображение верхнего слоя Ge, не закрытого Si

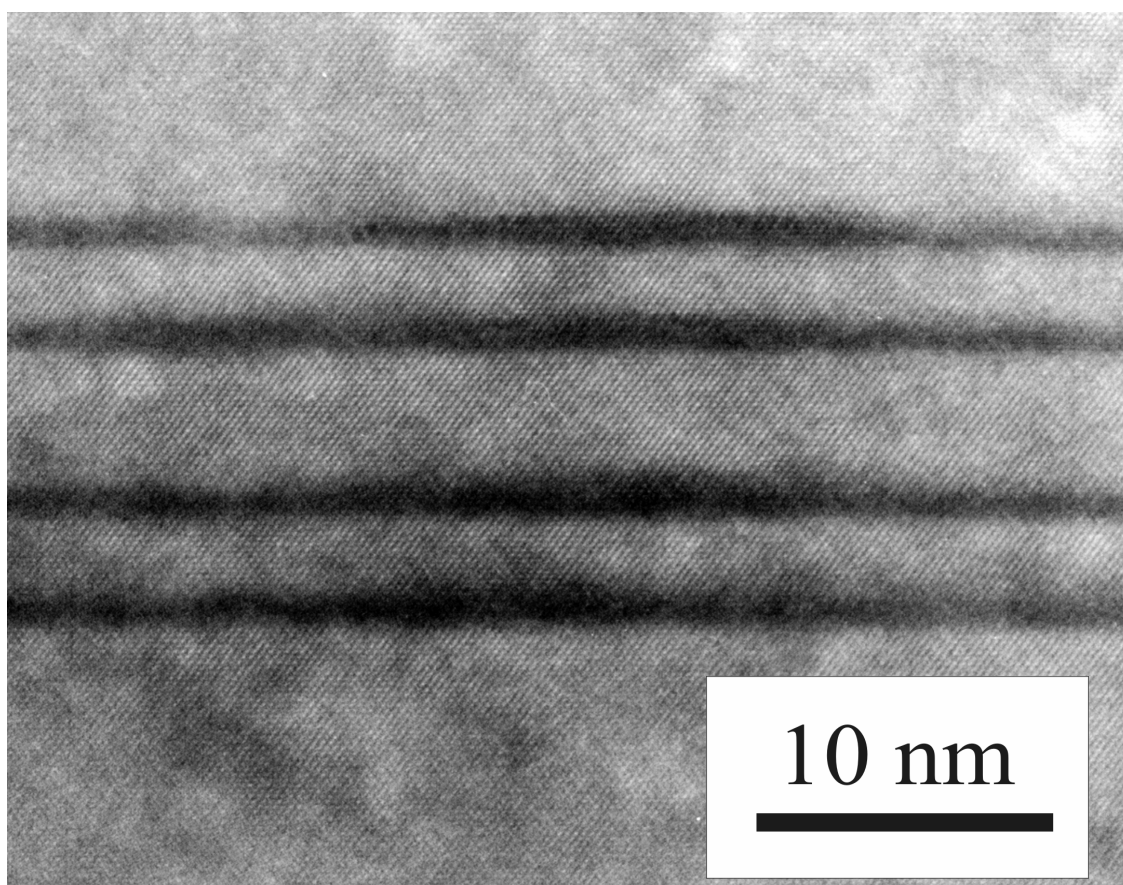


Рис. 3.9. Изображение поперечного среза структуры, полученное с помощью высокоразрешающей электронной микроскопии. Темные области – островки Ge

проводимости (G - T) от температуры приведены на рис.3.11. В области низких температур (~ 20 К) наблюдается резкое уменьшение емкости, сопровождаемое пиком на температурной зависимости проводимости (пик А). Это явление обусловлено вымораживанием электронов, поставляемых в зону проводимости Si донорной примесью в эпитаксиальном слое (carrier freeze-out effect) [94]. При $T \rightarrow 0$ величина емкости стремится к $90 - 100$ пФ и определяется уже не шириной области пространственного заряда, а расстоянием от металлического контакта до сильно легированной подложки.

В образце с КТ Ge на вольт-фарадной кривой наблюдается характерная ступень, связанная с дополнительной емкостью, которая обусловлена изменением заряда в слоях квантовых точек под действием переменного напряжения [95, 96]. При нулевом смещении массив КТ аккумулирует электроны и заряжен отрицательно. При $|U_b| > 2$ В КТ освобождаются от электронов и становятся нейтральными. В этой области напряжений C - V характеристики образцов с Ge и без Ge совпадают. На C - T характеристике образца с квантовыми точками Ge, как и на его C - V характеристике, присутствует дополнительный вклад в емкость, который исчезает при охлаждении образца ниже $35 - 40$ К и сопровождается дополнительным пиком (пик В) на температурной зависимости проводимости (рис.3.11). Это означает присутствие в слоях Ge/Si связанных электронных состояний с энергиями больше E_d . На рис.3.12 показана эволюция температурных зависимостей проводимости в образце с КТ при варьировании обратного смещения U_b . Амплитуда пика А слабо меняется при изменении U_b от 0 до -3 В. Аналогичное наблюдение справедливо и для контрольного образца. Поведение пика В иное: он полностью исчезает при $|U_b| > 2.2$ В. На рис.3.13 черными квадратами приведена амплитуда этого пика G_{max}/ω как функция U_b . Так же на рис представлена зависимость емкости от обратного смещения. Видно, что зависимость амплитуды от напряжения повторяет

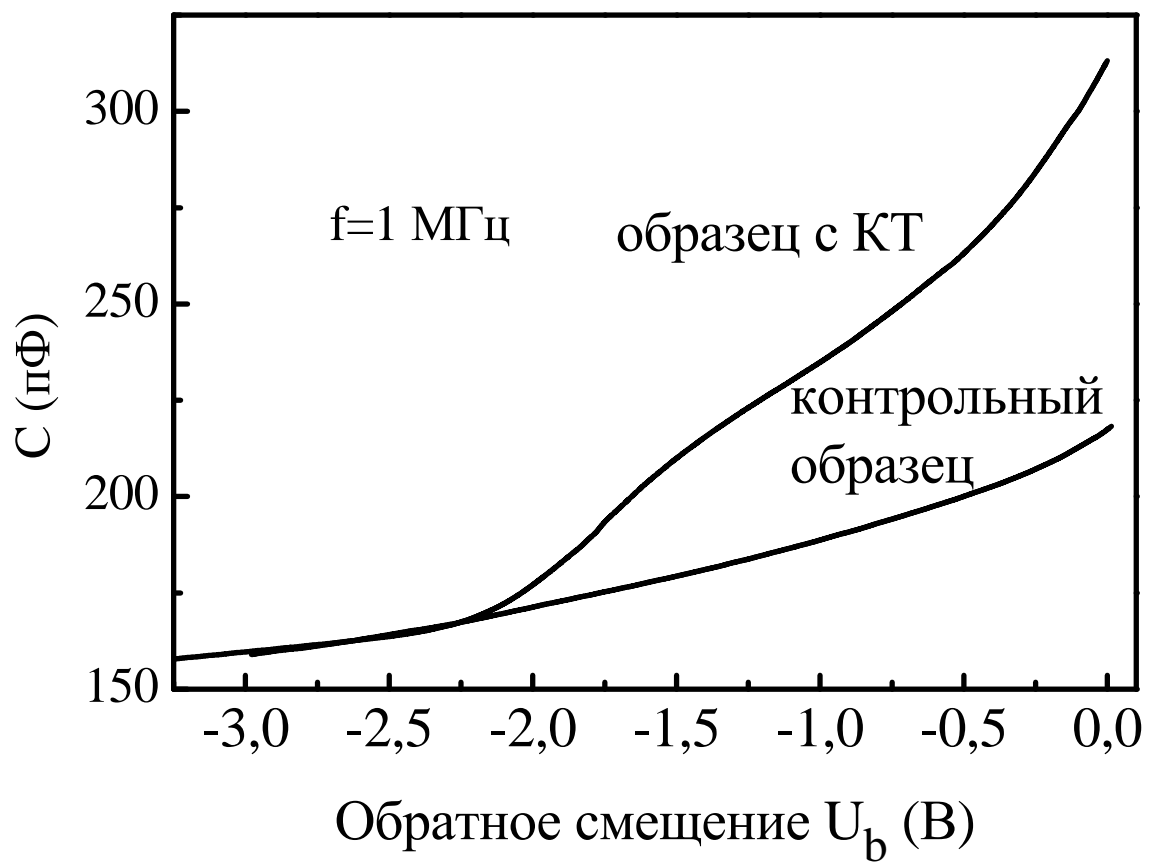


Рис. 3.10. Зависимости емкости от обратного смещения в контрольном образце и в образце, содержащем четыре слоя КТ Ge (правая и нижняя шкалы). Измерения выполнены при $T \approx 4$ К на частоте $f = 1$ МГц.

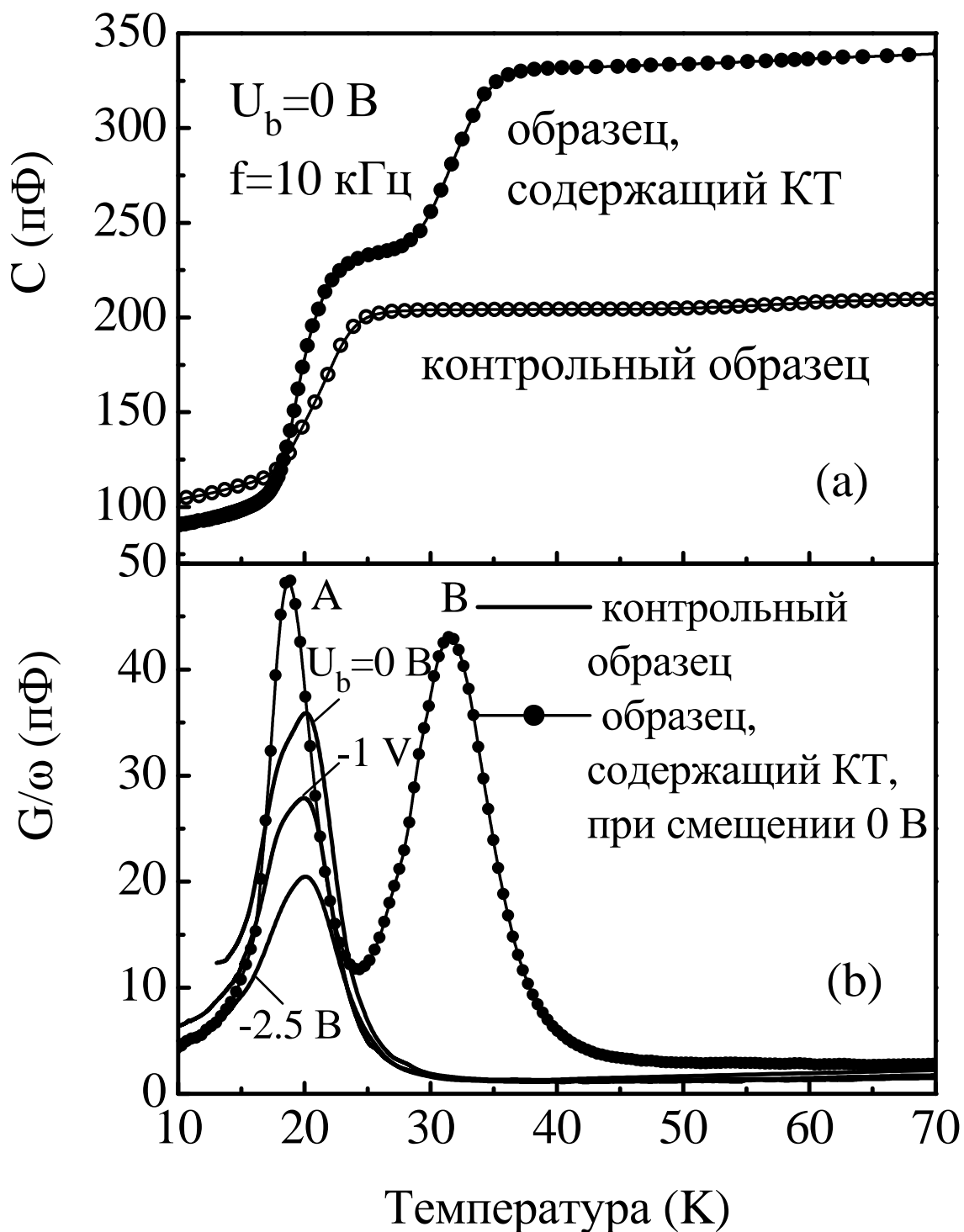


Рис. 3.11. Температурные зависимости (а) емкости и (б) проводимости контрольного образца и образца с квантовыми точками Ge на частоте 10 кГц. Кривые на рисунке (а) измерены при нулевом смещении. На рисунке (б) G-T характеристика для образца с КТ Ge приведена также для нулевого смещения. Зависимости проводимости от температуры для контрольного образца показаны для трех значений внешнего смещения.

C-V характеристику и тоже носит пороговый характер.

На температурной зависимости проводимости образца с КТ Ge наблюдается два пика, которые можно отнести с двумя разными по своей природе явлениями: с накоплением электронного заряда в слое квантовых точек и с вымораживанием носителей заряда в слабо легированном эпитаксиальном слое Si.

В случае эффекта вымораживания носителей заряда частота f_m , на которой проводятся измерения, и температура T_m , при которой наблюдается максимум проводимости, связаны соотношением [94] $f_m = AT_m^3 \exp(-E_a/k_B T_m)$, где A – независимый от температуры параметр, E_a – энергия активации, равная $E_d/2$, E_d – энергия ионизации примеси. Измерения G-T характеристик, выполненные для обоих образцов на различных частотах (см., например, рис.3.14), позволили определить энергию активации E_a (рис.3.15). Величина E_a оказалась одинаковой и в контрольном образце, и в образце с КТ и равна ≈ 20 мэВ (рис. 3.15), что как раз составляет примерно половину энергии ионизации примеси Sb в Si ($E_d = 39$ мэВ).

На рис.3.15 показаны типичные графики $e_n(T_m^{-1})$ для трех значений внешнего смещения, построенные в полулогарифмических координатах. Из угла наклона аппроксимирующих прямых линий были найдены энергии активации темпа эмиссии электронов E_{qd} (согласно выражению 2.33). Полученные таким образом величины E_{qd} приведены на рис.3.16. Энергия активации при самых больших смещениях ($|U_b| \approx 2$ В) имеет величину ~ 50 мэВ и представляет собой энергию связи электронов в основном состоянии в массиве КТ Ge/Si.

Полностью аналогичные измерения были проведены для гетероструктур с 4-мя слоями квантовых точек Ge/Si составом $c = 0.8$. Энергия связи электрона в таких структурах, определенная методом спектроскопии адмитанса составила ~ 70 мэВ. Сравнение результатов численного моделирование с экспериментальными результатами пока-

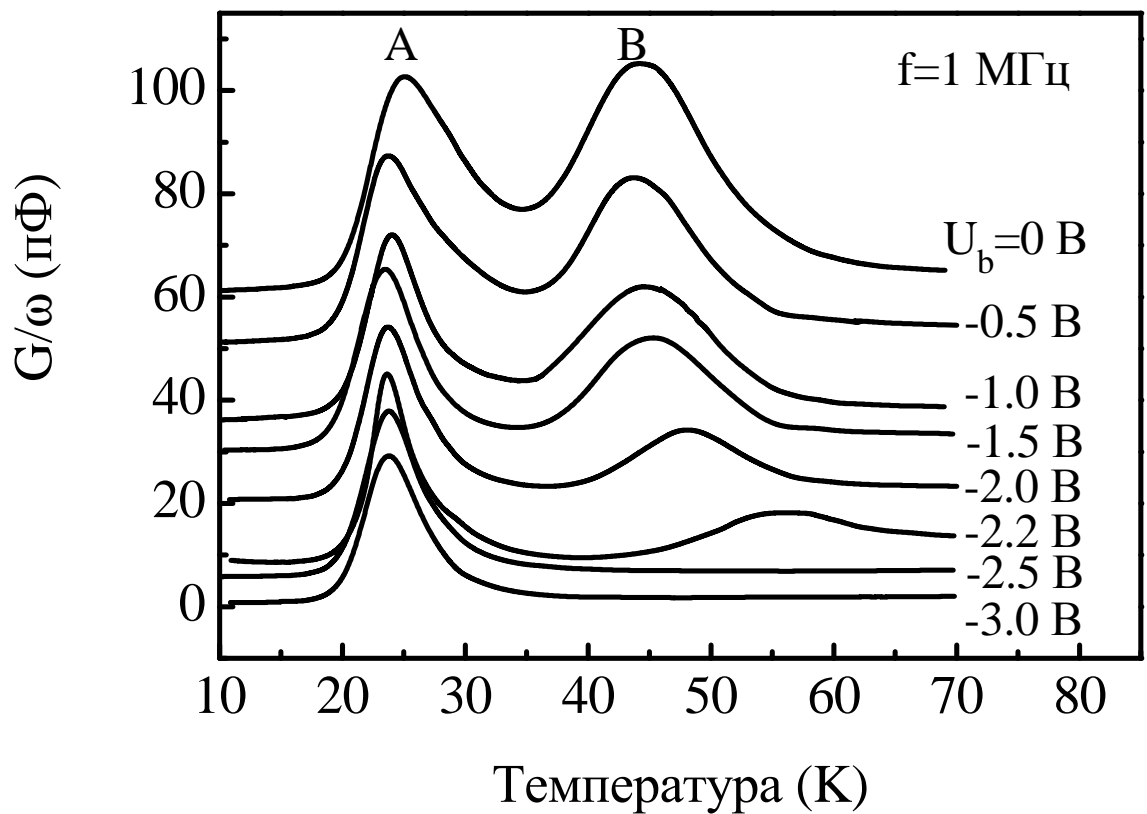


Рис. 3.12. Температурные зависимости проводимости в образце с квантовыми точками Ge при различном внешнем смещении. Для удобства кривые сдвинуты по вертикали с шагом 5 пФ.

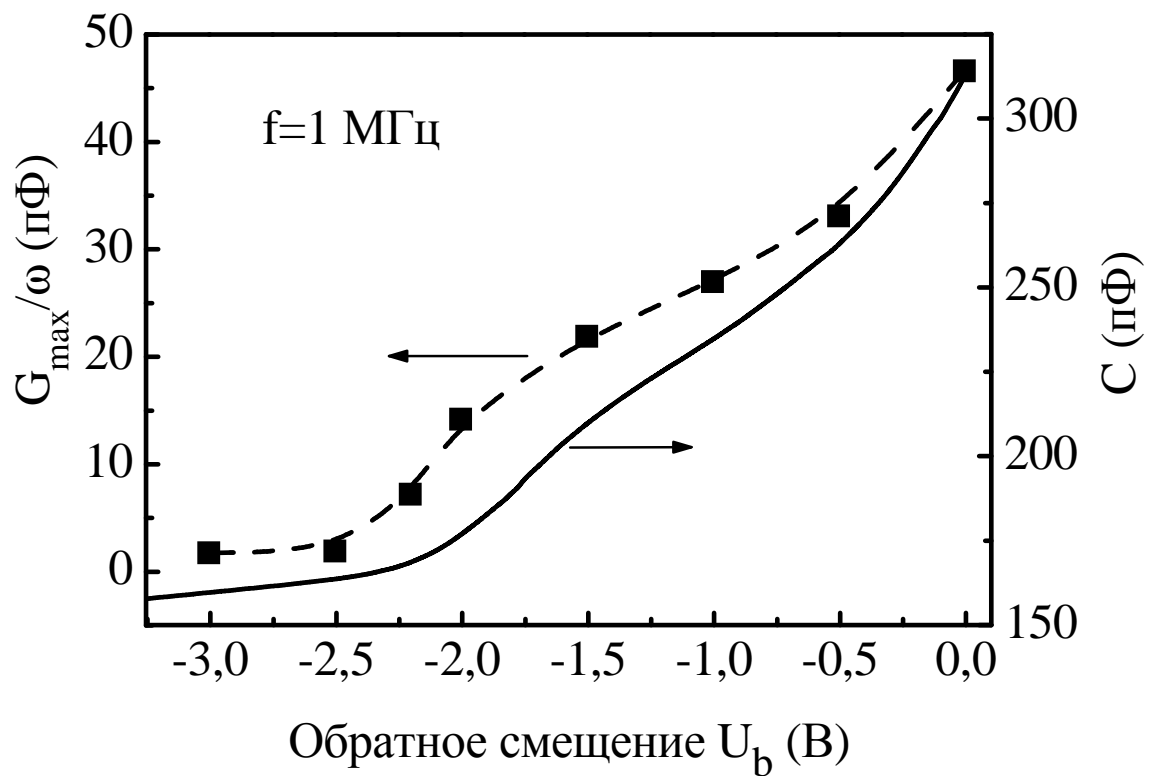


Рис. 3.13. Амплитуда пика B в зависимости от обратного смещения (левая и нижняя шкала). Зависимость емкости от обратного смещения (правая и нижняя шкала).

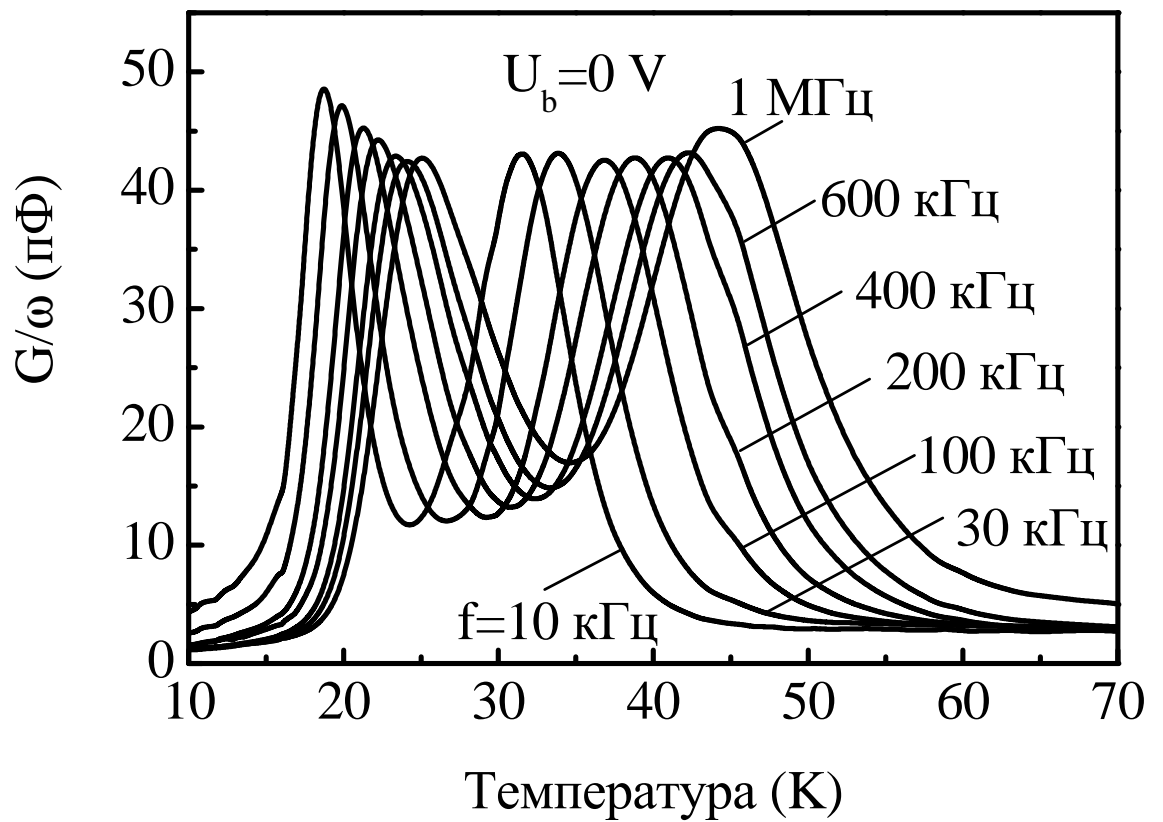


Рис. 3.14. Зависимости проводимости от температуры для образца с квантовыми точками Ge на различной частоте при нулевом напряжении смещения

зывает хорошее согласие эксперимента с теоретическими предсказаниями.

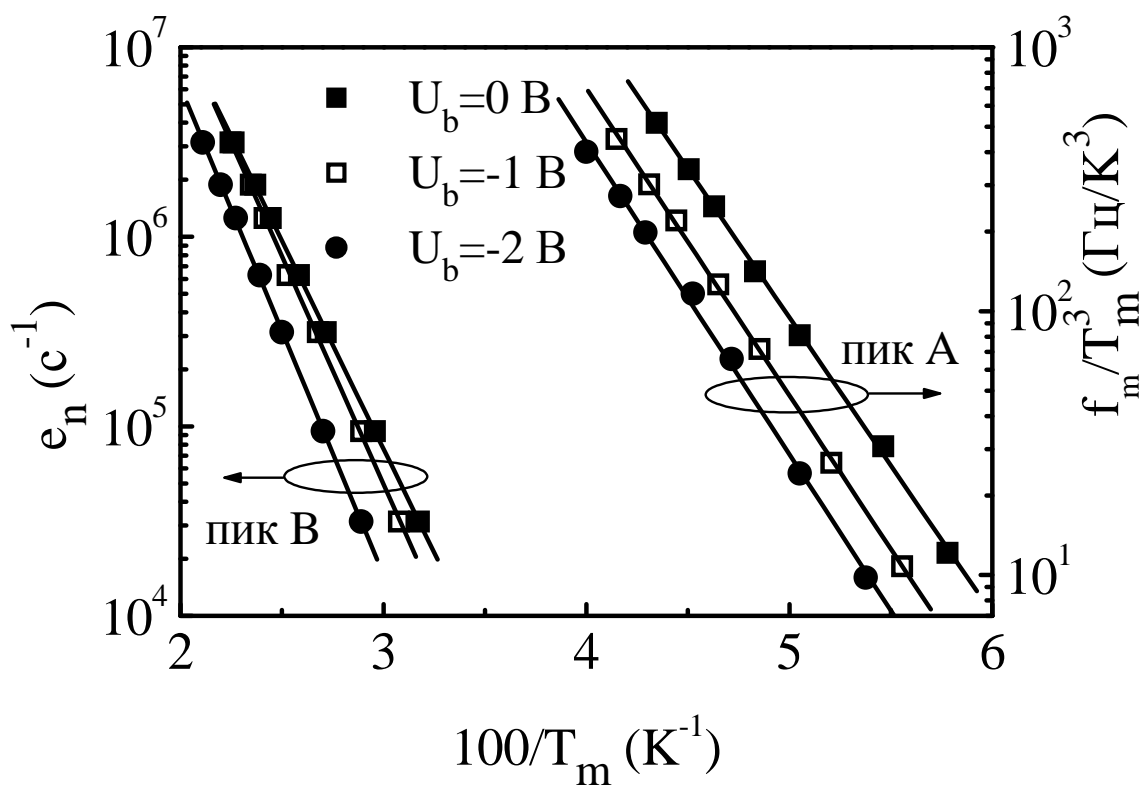


Рис. 3.15. Зависимости комбинации f_m/T_m^3 (см. текст) от обратной температуры, позволяющие определить энергию активации проводимости в эпитаксиальном слое. На рисунке показаны также температурные зависимости скорости эмиссии электронов e_n из связанных состояний в слоях КТ Ge в делокализованные состояния зоны проводимости Si.

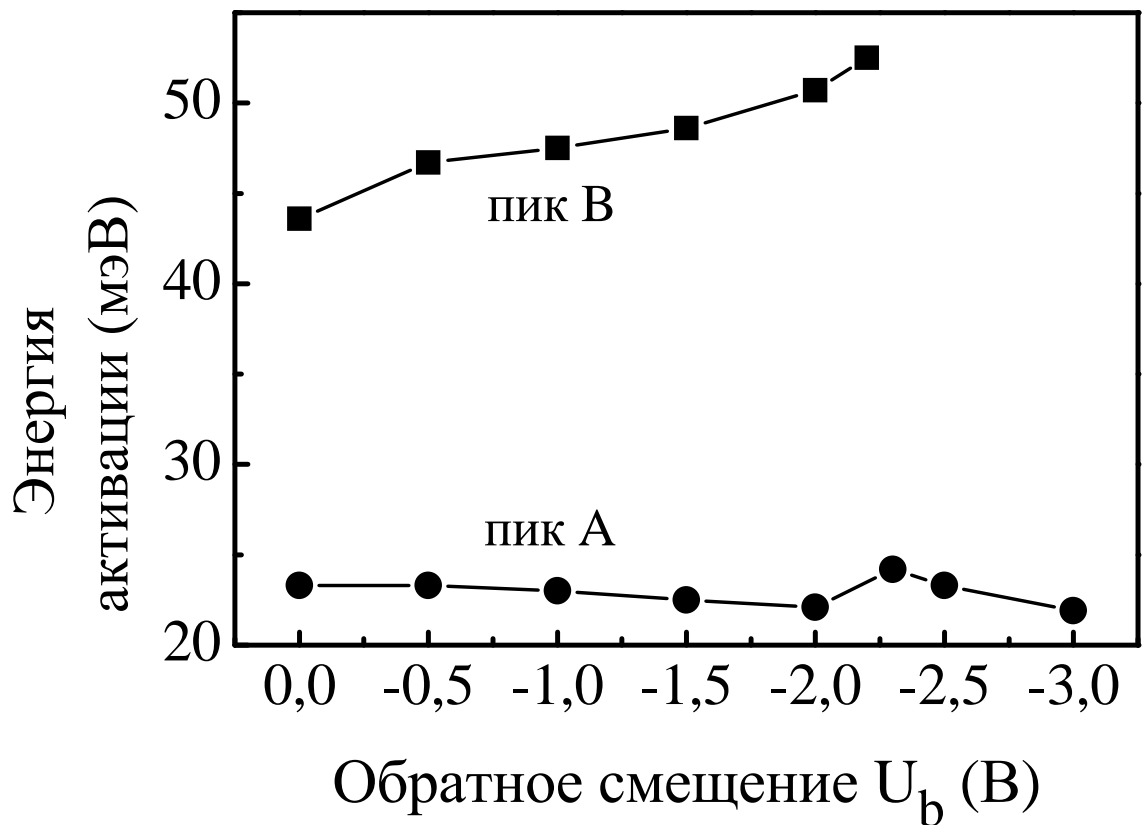


Рис. 3.16. Энергия активации проводимости для пика А (E_a) и энергия активации E_{qd} темпа эмиссии электронов из связанных состояний в КТ в зону проводимости Si (для пика В) для различного внешнего смещения.

Выводы к главе 3

1) В модели поля валентных сил с использованием межатомного потенциала Китинга рассчитаны механические напряжения в многослойных гетероструктурах Ge/Si(001) с вертикально совмещенными нанокластерами Ge. Обнаружено, что неоднородное пространственное распределение упругих деформаций в такой среде приводит к появлению в напряженных слоях Si вблизи нанокластеров Ge трехмерной потенциальной ямы для электронов глубиной до 100 мэВ.

2) Для структуры, состоящей из 4-х островков Ge, расположенных один над другим, определены энергии связи электронов в этой яме и пространственное распределение плотности электронного заряда. Основное состояние имеет s-образную симметрию, а энергия связи увеличивается от 60 мэВ до 90 мэВ при увеличении состава Ge в квантовых точках от 0.7 до 1.

3) Экспериментально исследован отклик комплексной проводимости кремниевых диодов Шоттки со встроенными в базовую область 4 слоями квантовых точек Ge на внешнее переменное электрическое поле, обусловленный эмиссией электронов из связанных состояний в отщепленных деформацией Δ -долинах Si вблизи нанокластеров Ge в делокализованные состояния зоны проводимости ненапряженного Si. Для структур с составом Ge в нанокластерах $c = 0.7$ и $c = 0.8$ экспериментально определена энергия связи электронов, равная 50 мэВ, и 70 мэВ, что согласуется с данными с результатами численного распределения упругих напряжений и электронной структуры исследуемых образцов.

Глава 4

Энергетический спектр и дырочные состояния в двойных вертикально-связанных квантовых точках Ge/Si

4.1 Одночастичные дырочные состояния

4.1.1 Выбор модели

Квантовые точки являются предельным случаем систем пониженной размерности. Размерность в таких системах равна нулю. Поэтому их можно считать искусственными аналогами атомов. Другим интересным случаем систем пониженной размерности можно считать пару туннельно связанных квантовых точек. Такая система образует искусственный аналог двухатомной молекулы. Волновые функции носителей заряда, локализованных на отдельных квантовых точках гибридизуются образуя аналог ковалентной связи и формируя аналог молекулярных орбиталей. При этом управляя формой и размером нанокластеров в процессе роста структуры можно получать искусственные молекулы с заранее заданными свойствами. Движущей силой формирования квантовых точек, коррелированных в направлении роста является неоднородное распределение упругих деформаций, возника-

ющих в процессе роста упруго напряженных систем. Примером таких систем могут служить квантовые точки InAs в матрице GaAs и квантовые точки Ge в матрице Si. При формировании упруго напряженных квантовых точек напряжения из слоя квантовых точек проникают в окружающую матрицу. В результате квантовые точки формирующиеся на следующем слое растут на напряженной подложке. Поскольку в областях над квантовыми точками первого слоя постоянная решетки подложки ближе к постоянной решетки материала квантовой точки, то там и зарождаются островки следующего слоя. Механические напряжения возникающие при гетероэпитаксии упруго-напряженных систем играют ключевую роль при формировании энергетического спектра в слоях квантовых точек, так как изменяют размеры и форму элементарной ячейки, что приводит к сдвигу экстремумов зоны Бриллюэна и снятию вырождения состояний из-за понижения симметрии.

В гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками Ge формируется II-й тип выравнивания зон. В квантовых точках данного типа локализуются носители заряда только одного знака - дырки. Электроны при этом делокализованы в зоне проводимости Si [93]. Из-за отсутствия центра инверсии в структуре с двумя вертикально совмещенными квантовыми точками деформации для “верхней” и “нижней” точек различаются, даже если точки одинаковы по своим размерам и форме. Асимметрия механических напряжений в двойной квантовой точке должна приводить к существенной модификации энергетического спектра носителей заряда по сравнению с двухатомными молекулами.

В нашей работе моделировались структуры, содержащие Ge/Si квантовые точки, упорядоченные в вертикальном направлении. В экспериментах по выращиванию на поверхности Si (001) нанокристаллов Ge, формируются островки в форме четырехгранных пирамид или “hut”-кластеров [23, 27]. Такие нанокластеры имеют квадратное или прямоугольное основание и боковые грани образованные кристаллографиче-

скими плоскостями $\{105\}$. При огранке таким плоскостями отношения высоты пирамиды к её основанию составляет 0.1, т. е. квантовые точки получаются достаточно плоскими. При моделировании мы использовали размер и форму нанокластеров Ge максимально соответствующую экспериментальной ситуации (рис. 4.1). Размеры основания островков Ge составляли 10-20 нм, отношения высоты к основанию составляло 0.1. Каждый нанокластер располагался на смачивающем слое, толщиной 4 монослоя Ge. Ячейка для моделирования имела размеры $27.5 \times 27.5 \times 70$ нм. Схематическое изображение модельной структуры изображено на рис. 4.2

В нашей работе для расчета деформаций нанокластеров было использовано приближение сплошной среды в сочетании с методом конечных элементов. Данный метод полностью реализован в программном обеспечении Comsol Multiphysics, что позволило значительно сократить время при использовании данного подхода.

Для определения энергетического спектра нужно задать гамильтониан \hat{H} , а затем из уравнения Шрёдингера $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ определить набор значений энергии E и соответствующих им стационарных состояний $|\Psi\rangle$. Разные способы задания гамильтониана и пространства состояний, в котором он действует, соответствуют разным методам описания электронной структуры рассматриваемой системы. Выше в литературном обзоре были рассмотрены методы, использованные разными авторами для расчёта энергетического спектра в квантовых точках. Сопоставим два основных метода расчёта электронной структуры: метод эффективной массы и метод сильной связи. Для сопоставления методов эффективной массы и сильной связи, применительно к задаче данной главы, наиболее важным критерием является область применимости метода и вычислительное время, затрачиваемое на расчет энергетического спектра. Основное ограничение области применимости метода эффективной массы - это требование “плавности” огибаю-

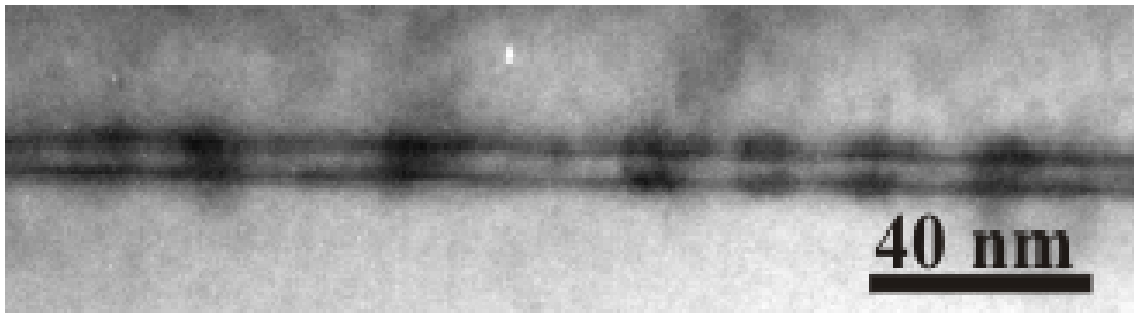


Рис. 4.1. Изображение поперечного среза структуры, полученное с помощью высокоразрешающей электронной микроскопии. Темные области – островки Ge. Данное изображение получено в работе [97]

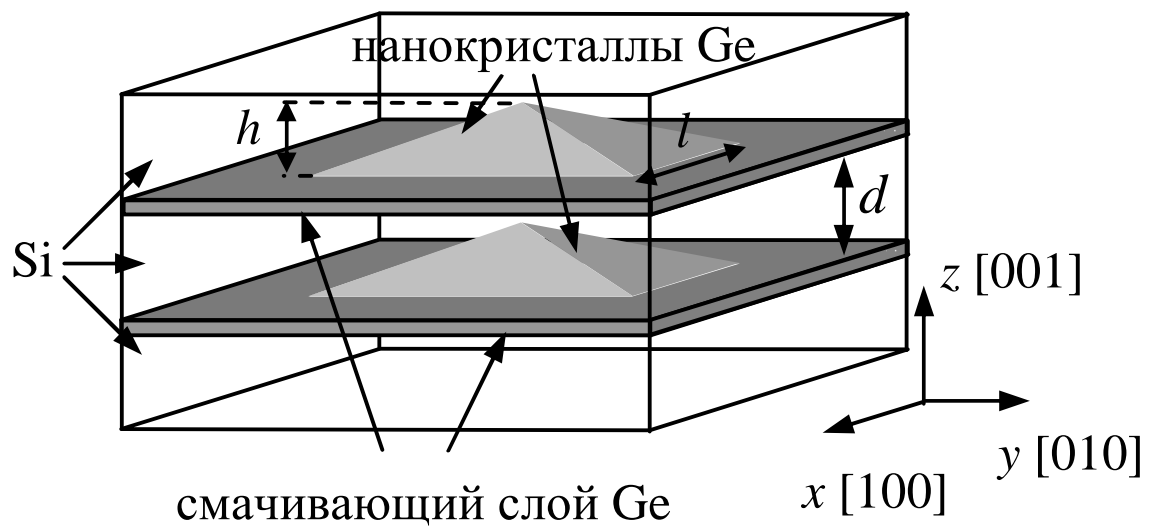


Рис. 4.2. Схематическое изображение двойной квантовой точки, состоящей из двух пирамидальных нанокластеров Ge, расположенных один над другим в направлении роста структуры z и разделенных слоем Si толщиной d

щей волновой функции: характерный масштаб изменения огибающей должен быть большим по сравнению с размерами элементарной ячейки кристалла. Для рассматриваемых квантовых точек Ge в Si (рис. 2.1) таким характерным масштабом является толщина Ge слоя в том месте, где эта толщина максимальна, - а именно, вблизи оси симметрии пирамидального островка. Действительно, максимальная толщина означает максимальную неопределённость координаты Z , а значит, минимальную неопределённость p_z -компоненты импульса и, следовательно, минимальную кинетическую энергию (ось Z перпендикулярна плоскости Ge слоя - см. рис. 2.1). Таким образом, дырке энергетически выгодно находиться в области оси симметрии пирамиды. Максимальная толщина слоя Ge складывается из толщины смачивающего слоя (4 МС) и высоты островка (8 - 16 МС) и составляет 12 - 20 МС. В качестве элементарной ячейки решётки типа алмаза обычно выбирают куб размером в 4 монослоя, содержащий 8 атомов; однако наименьшая возможная элементарная ячейка, содержащая 2 атома, имеет высоту 2 монослоя. Таким образом, отношение характерного размера огибающей волновой функции к размеру элементарной ячейки составляет $\approx 6 \div 10$. По нашему мнению, такая величина отношения примерно соответствует границе области применимости метода эффективной массы, то есть использование этого метода для решения нашей задачи оправданно.

Метод сильной связи не накладывает ограничений на толщину слоя Ge, - его можно применять, в принципе, для описания сколь угодно малых объектов, вплоть до единичного атома .

Метод эффективной массы, тем не менее, тоже обладает некоторыми привлекательными особенностями. Он требует меньшего числа входных параметров, зависящих от вещества, по сравнению с атомистическими методами. Причём параметры, фигурирующие в методе эффективной массы (например, эффективные массы, параметры

Латтинжера, константы деформационного потенциала), могут быть определены непосредственно из экспериментальных данных или из *ab initio* расчётов зонной структуры. Параметры метода сильной связи - энергии орбиталей и энергетические интегралы перекрытия между орбиталями - определяются путём подгонки зонной структуры вещества, и поэтому возможны неточная подгонка или неоднозначное определение параметров. Ещё одно преимущество метода эффективной массы заключается в его большей гибкости - так, для описания состояний валентной зоны в окрестности -точки зоны Бриллюэна этим методом можно использовать однозонную, четырёх-, шести- или восьмизонную модели, тогда как метод сильной связи требует по меньшей мере набора орбиталей sp^3 , соответствующего восьмизонной модели. Гибкость метода эффективной массы проявляется и в том, что, решая уравнение Шрёдингера с помощью конечных разностей, можно произвольно выбирать шаг сетки, а в методе сильной связи такой возможности нет, потому что в качестве “сетки” выступает кристаллическая решётка. В результате вычисление дырочного спектра Ge/Si квантовых точек методом эффективной массы требует на один-два порядка меньшего времени счета, чем при использовании метода сильной связи. Кроме того, метод эффективной массы допускает возможность приближенных аналитических решений [77].

Расчет энергетического спектра в данной работе проводился методом разновидностями метода эффективной массы. Основная часть расчетов была проведена в рамках 6-ти зонного метода, однако в ряде случаев использовались 1-но и 4-х зонные модели для понимания результатов, полученных 6-ти зонным методом. Так же в расчетах учитывались различные подходы в описании деформаций, возникающих в островках Ge: в качестве нулевого приближения мы рассматривали недеформированные островки Ge, на следующем этапе мы воспользовались приближением псевдоморфно-напряженных островков, и на

последнем этапе мы рассматривали реалистичную картину неоднородного распределения упругих деформаций в островках Ge.

4.1.2 Энергетический спектр дырок в двойных квантовых точках

Распределение упругой деформации было рассчитано в приближении сплошной среды в сочетании с методом конечных элементов. Для расчета использовалось программное обеспечение Comsol Multiphysics. На рис. 4.3 приведены деформации структур с двумя вертикально связанными квантовыми точками Ge/Si при различных расстояниях между квантовыми точками. Из рисунка видно, что двуосная деформация, которая определяет расщепление зон в валентной зоне, а так же их относительный сдвиг уменьшается в верхней точке по сравнению с нижней при уменьшении расстояния между квантовыми точками. Кроме того двуосная деформация в двойных вертикально-совмещенных квантовых точках релаксирует по сравнению с одиночной квантовой точкой.

На первом этапе рассмотрим энергетический спектр дырок в двойных квантовых точках в однозонном приближении. Поскольку основной вклад в волновую функцию дырки вносит подзона тяжелых дырок, то на первом этапе мы рассмотрим однозонное приближение, в котором учтем только подзону тяжелых дырок. На рисунке 4.4 показана энергия связи дырки в двойной квантовой точке, латеральным размером 15 нм при различных расстояниях между квантовыми точками. Из рисунка видно, что при увеличении расстояния между квантовыми точками, происходит уменьшение энергии связи дырки в основном состоянии по сравнению со случаем одиночной квантовой точки. Основное состояние при всех размерах квантовой точки является связывающим, первое возбужденное - антисвязывающим. Средняя энергия связи $E_{gu} = (E_g + E_u)/2$ увеличивается с увеличением расстояния меж-

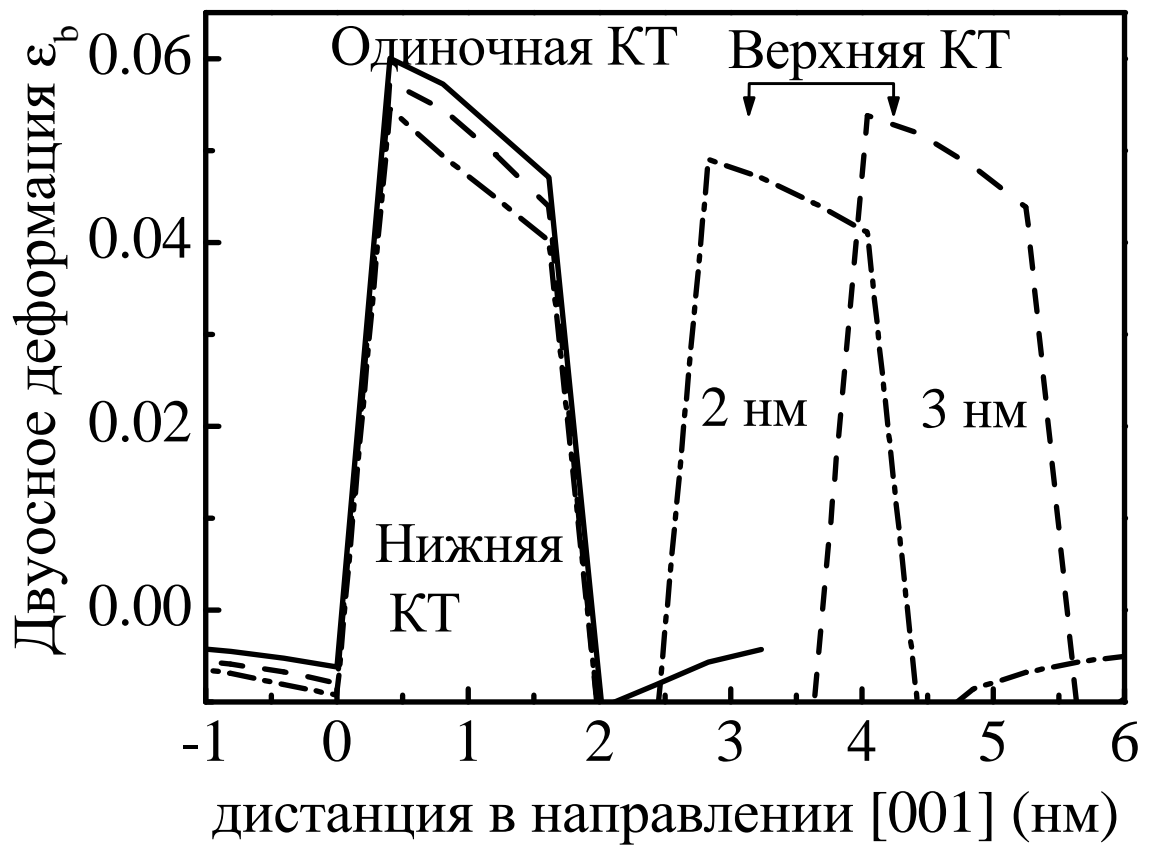


Рис. 4.3. Распределение двуосной деформации $\epsilon_b = \epsilon_{zz} - 0.5(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})$ вдоль вертикальной оси симметрии структуры.

ду квантовыми точками. Для объяснения эффекта увеличения средней энергии связи с увеличением расстояния между квантовыми точками и уменьшения энергии связи в основном состоянии ниже энергии связи в одиночной квантовой точке рассмотрим влияние упругих деформаций на энергетический спектр дырок.

Тензор деформаций в произвольной точке структуры имеет вид матрицы 3x3:

$$\hat{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Как и любой тензор третьего ранга его можно привести к главным осям. Поскольку наши структуры обладают осью симметрии, проходящей через вершину пирамиды, то после приведения к главным осям тензор деформации будет содержать только две независимые компоненты. Эти компоненты можно представить в виде линейной комбинации гидростатической деформации $\varepsilon_h = \text{Tr } \hat{\varepsilon}$, которая описывает всестороннее сжатие вещества в данной точке, и двусосной деформации $\varepsilon_b = \varepsilon_{zz} - 0.5(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$, которая описывает изменение формы элементарного объема. Под влиянием гидростатической деформации все подзоны валентной зоны смещаются одинаково, что может быть записано как смещение “взвешенного среднего” по положению трех подзон валентной зоны:

$$\Delta E_{av}^{VB} = a_v \varepsilon_h. \quad (4.2)$$

В то же время под влиянием двусосной деформации происходит расщепление подзон валентной зоны и изменение их относительного положения. Подзона тяжелых дырок при этом смещается по закону:

$$\Delta E_{hh} = b \varepsilon_b. \quad (4.3)$$

А подзоны легких дырок и спин-орбитально отщепленная подзона

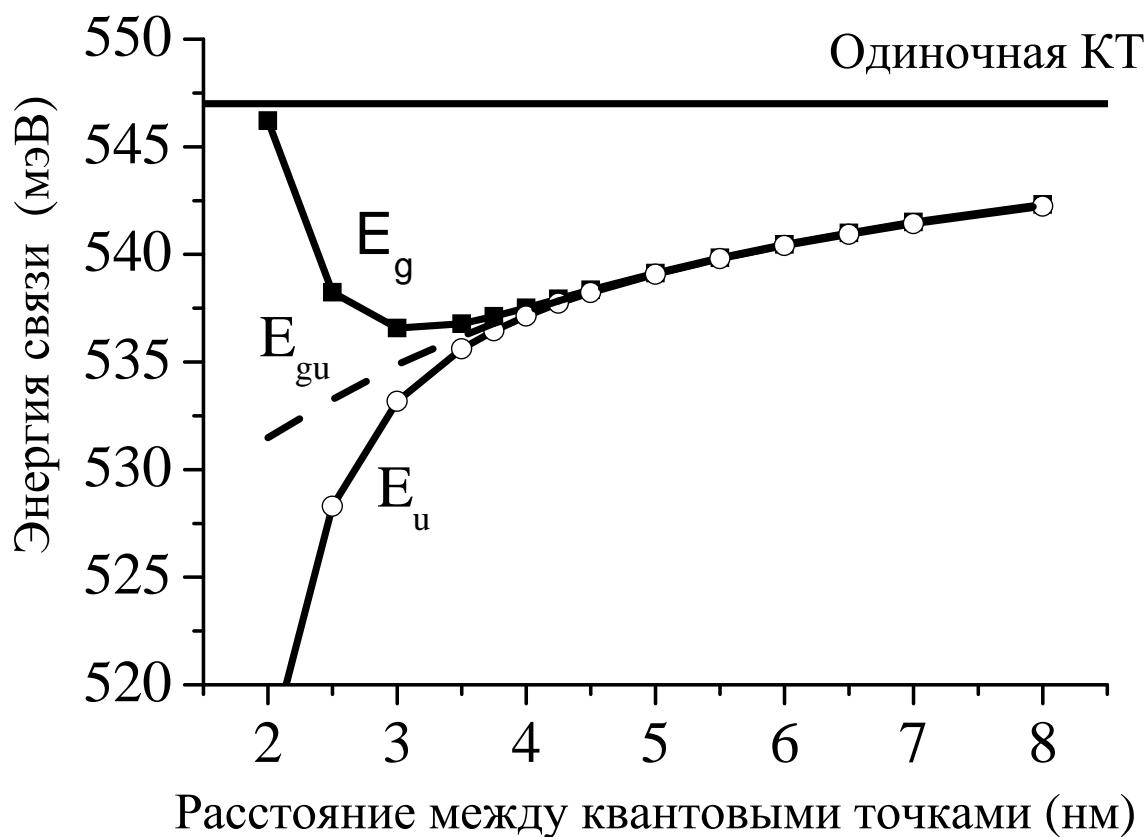


Рис. 4.4. Энергия связи дырки в основном (E_g) и первом возбужденном (E_u) состоянии в двойной квантовой точке, при различных расстояниях между квантовыми точками, рассчитанная в однозонном приближении. Так же на графике показана средняя энергия по связывающему и антисвязывающему состоянию $E_{gu} = (E_g + E_u)/2$. Размер основания островков Ge составляет $l = 15$ нм

под влиянием такой деформации меняют свое положение следующим образом [77]:

$$\begin{aligned}\Delta E_{lh} &= -\Delta E_{hh} - \frac{1}{2}[(\Delta_0 + \Delta E_{hh}) - \sqrt{(\Delta_0 + \Delta E_{hh})^2 + 8(\Delta E_{hh})^2}], \\ \Delta E_{lh} &= -\Delta E_{hh} + \frac{1}{2}[(\Delta_0 + \Delta E_{hh}) - \sqrt{(\Delta_0 + \Delta E_{hh})^2 + 8(\Delta E_{hh})^2}].\end{aligned}\tag{4.4}$$

Из рисунка 4.3 видно, что внутри нанокластеров Ge двуосная деформация положительна. Поэтому под действием такой деформации подзона тяжелых дырок смещается в верх по энергии, то есть увеличивает глубину потенциальной ямы для дырок. Поэтому в результате действия упругой деформации увеличивается энергия связи дырки в квантовой точке по сравнению со случаем, когда деформации нет. В случае образования связывающей и антисвязывающей орбиталей при сближении двух одинаковых потенциальных ям в случае электронов энергия связывающего и антисвязывающего состояния могут быть записаны как:

$$E_g = E_0 + \Delta_T/2,\tag{4.5}$$

$$E_u = E_0 - \Delta_T/2,\tag{4.6}$$

где E_0 – энергия в одиночной потенциальной яме, а Δ_T – интеграл перекрытия. Соответственно средняя энергия в этом случае E_{gu} равна энергии в одиночной потенциальной яме E_0 . В структурах, содержащих два слоя квантовых точек двуосная деформация релаксирует по сравнению со случаем одиночной квантовой точки, что приводит к уменьшению глубины потенциальной ямы для дырок и соответственно к уменьшению энергии связи дырки в двойной квантовой точке по сравнению со случаем одиночной квантовой точки. Поэтому средняя энергия E_{gu} по связывающему и антисвязывающему состоянию в

двойной квантовой точке меньше, чем в одиночной квантовой точке. До тех пор, пока интеграл перекрытия E_T превышает разницу в энергии между уровнями в одиночной квантовой точке и средней энергии E_{gu} энергия связи в основном состоянии дырки в двойной квантовой точке оказывается больше, чем в случае одиночной квантовой точки. Поскольку интеграл перекрытия спадает экспоненциальным образом с увеличением расстояния, а деформации только степенным, то существует некое критическое расстояние t_0 между квантовыми точками при котором энергия связи дырки в двойной квантовой точке становится меньше, чем энергия связи дырки в одиночной квантовой точке.

На втором этапе был рассмотрен энергетический спектр в двойной квантовой точке в приближении 6-ти зон, в этом случае учитываются все подзоны валентной зоны. На рисунке 4.5(а) представлен энергетический спектр дырок в недеформированной двойной квантовой точке в зависимости от расстояния между точками. Из рисунка видно, что при увеличении расстояния между квантовыми точками средняя энергия связи не изменяется и равна энергии связи в одиночной квантовой точке. На рисунке 4.5 (б) представлен энергетический спектр псевдоморфно деформированной двойной квантовой точки. Из рисунка видно, что средняя энергия связи так же как и в случае недеформированной двойной квантовой точки оказывается равна энергии связи в одиночной квантовой точке. Однако при увеличении расстояния между квантовыми точками наблюдается смена симметрии основного состояния от симметричного к антисимметричному. Поскольку отличие ситуации на рис 4.5 (б) от 4.5 (а) только в наличии упругих деформаций, то видимо именно они ответственны за смену симметрии основного состояния.

На рис. 4.5 (в) изображен энергетический спектр дырок в двойной квантовой точке с неоднородным распределением упругой деформации. Из рисунка видно, что при увеличении расстояния между кван-

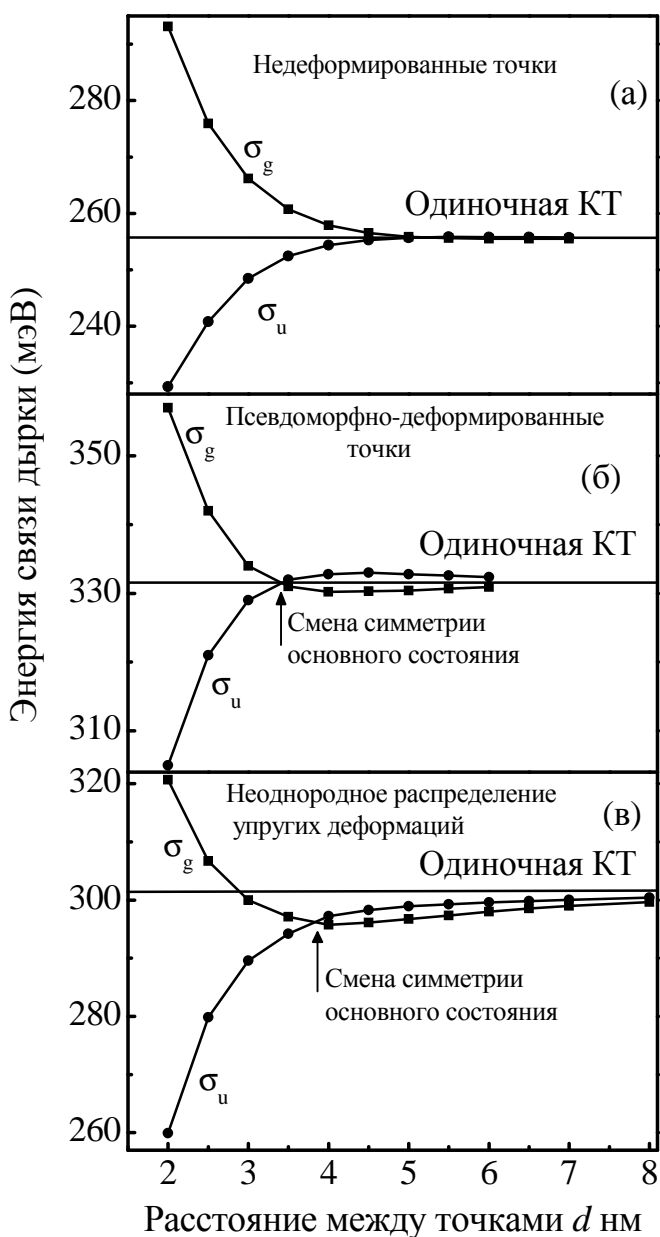


Рис. 4.5. Эволюция энергии связи дырки в связывающем (σ_g) и антисвязывающем (σ_u) состоянии, как функция расстояния между квантовыми точками, рассчитанная для размера квантовых точек $l = 10$ нм в случае недеформированных нанокластеров (а), псевдоморфно деформированных нанокластеров (б), неоднородно деформированных нанокластеров (в) в рамках $6 \times 6 \mathbf{k}$ -модели. Для сравнения на графике показана энергия связи одиночной квантовой точки. Все энергии отсчитываются от потолка валентной зоны ненапряженного Si

товыми точками средняя энергия связи увеличивается. Расщепление связывающего и антисвязывающего состояния становится несимметричным относительно энергии связи в одиночной квантовой точке. Поскольку такая же картина с несимметричным расщеплением связывающего-антисвязывающего состояния наблюдалась и в однозонном приближении, то становится ясно, что за такую асимметрию ответственно неоднородное распределение упругих деформаций. Понижение энергии связи дырки в двойной квантовой точке по сравнению со случаем одиночной квантовой точки в 6-ти зонном приближении может быть объяснено так же как и в однозонном случае, поскольку основное состояние дырки состоит преимущественно из тяжелых дырок. Отдельно рассмотрим причину смены симметрии основного состояния в двойной квантовой точке.

На рис. 4.6 изображены профили всех 6-ти компонент волновых функций дырки в двойной квантовой точке латеральным размером 15 нм и расстоянием между точками 5 нм. Из Рисунка видно, что все компоненты волновой функции имеют либо полностью симметричную либо полностью антисимметричную природу. Данный результат отличен от результата Climente *et al* [98]. В работе [98] было показано, что при использовании 4-х зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -приближения, симметрия компонент волновых функций, соответствующих подзонам тяжелых и легких дырок различная. В этом смысле симметрия волновой функции перестает быть “хорошим” квантовым числом, а дырочный туннельный матричный элемент становится отрицательным при больших расстояниях между квантовыми точками. Обычно использование 4-х зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -метода обосновывают тем, что подзона, отщепленная спин-орбитальным взаимодействием расположена далеко от подзон тяжелых и легких дырок и не оказывает особого влияния на низшие дырочные состояния. Однако в квантовых точках малого размера энергия связи дырки сравнима с энергией спин-орбитального расщепления,

что приводит к необходимости учитывать спин-орбитально отщепленную подзону. Кроме того, упругие деформации, возникающие в квантовых точках расщепляют подзоны тяжелых и легких дырок и смещают спин-орбитально отщепленную подзону. Поэтому вклады подзон легких дырок и спин-орбитально отщепленной подзоны оказываются сравнимыми.

Для того чтобы проверить это предположение мы провели расчет энергетического спектра дырок в 4-х зонном приближении, используя гамильтониан Латинжера-Кона [48,99], учитывая лишь подзоны с полным моментом $J = 3/2$ и проекцией $J_z = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$. Энергетический спектр был рассчитан с учетом неоднородного распределения упругих деформаций и для случая недеформированных точек. На рис. 4.7 представлены профили компонент волновой функции дырки в случае 4-х зонного приближения для основного и первого возбужденного состояния. Из рисунка видно, что подзоны тяжелых и легких дырок имеют противоположную симметрию волновых функций, что приводит к появлению отрицательного туннельного матричного элемента. Данный результат полностью аналогичен результату, полученному в работе [98]. На рис. 4.8 представлено расщепление связывающего и антисвязывающего состояния в зависимости от расстояния между квантовыми точками для различных расчетных приближений. Из рисунка видно, что в случае 4-х зонного приближения антисвязывающее основное состояние возникает как в случае деформированных квантовых точек, так и в случае недеформированных. При этом величина этого расщепления сравнима для деформированной и недеформированной квантовой точки. Кроме того в случае 4-х зонного приближения величина расщепления выше, чем в случае 6-ти зонного приближения. Ещё одно существенное отличие, результатов 4-х зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ метода от 6-ти зонного это соотношение доли тяжелых дырок в волновой функции дырки для связывающего и антисвязывающего состояния. В случае 6-

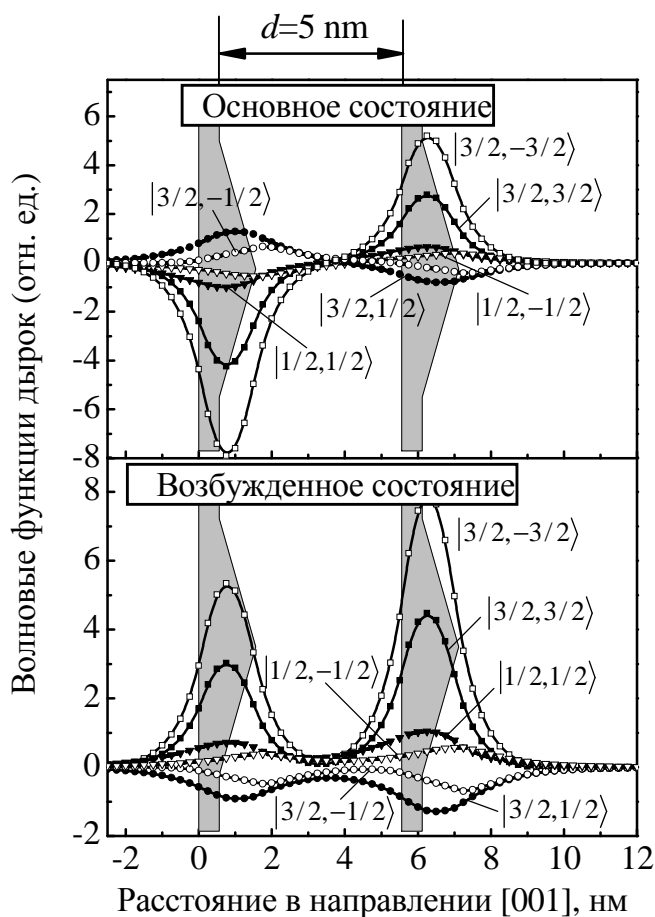


Рис. 4.6. Пространственное распределение 6-ти компонент волной функции дырки в вдоль вертикальной оси симметрии z . Расстояние между квантовыми точками $d = 5$ нм. Затененные области соответствуют нанокластерам Ge и смачивающему слою. Ноль горизонтальной шкалы выбран по нижней границе смачивающего слоя нижней точки. Данные получены в рамках 6-ти зонной модели с неоднородным распределением упругих деформаций.

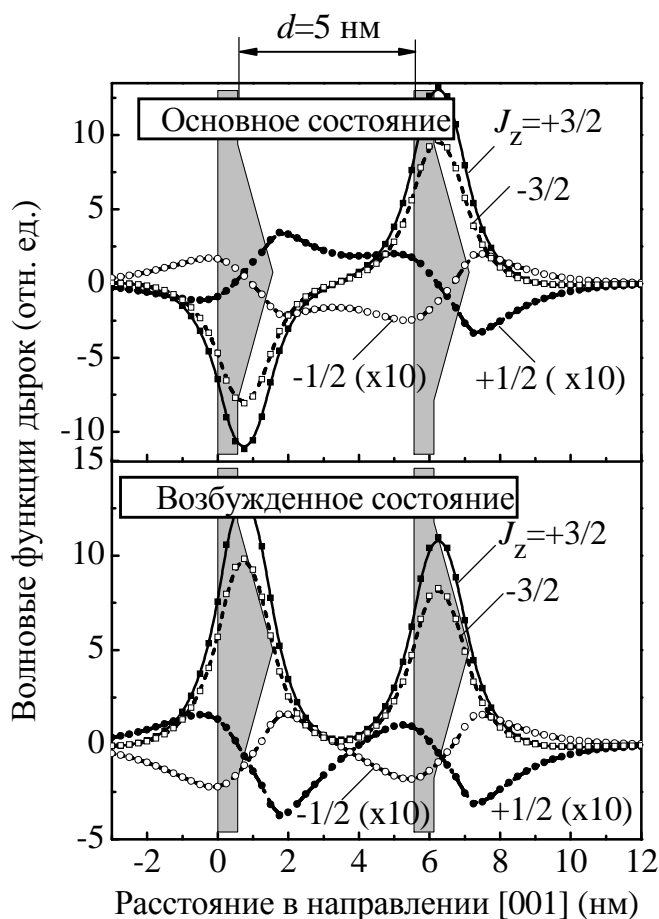


Рис. 4.7. Пространственное распределение 4-ти компонент волной функции дырки в вдоль вертикальной оси симметрии z . Расстояние между квантовыми точками $d = 5$ нм. Затененные области соответствуют нанокластерам Ge и смачивающему слою. Ноль горизонтальной шкалы выбран по нижней границе смачивающего слоя нижней точки. Данные получены в рамках 4-х зонной модели с неоднородны распределением упругих деформаций.

ти зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ метода, доля тяжелых дырок в волновой функции выше в случае антисвязывающего состояния (см. рис. 4.9), чем в случае связывающего. В 4-х зонном приближении однако ситуация ровно противоположная. Доля тяжелых дырок с случае связывающего состояния выше, чем в случае антисвязывающего.

Дальнейшее обсуждение будет посвящено причине смены симметрии основного состояния дырки в рамках 6-ти зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ метода. Согласно выражению 4.4, в одноосно сжатом германии подзона тяжелых дырок движется вверх по абсолютной энергетической шкале, в то время как подзоны легких дырок и спин-орбитально отщепленная подзона движутся в противоположные стороны. При малых расстояниях между квантовыми точками расположение уровней связывающего и антисвязывающего состояния определяется квантово-механическим перекрытием волновых функций, локализованных на отдельных точках. При увеличении расстояния между квантовыми точками, происходит экспоненциальное уменьшение интеграла перекрытия, и расщепление между связывающим и антисвязывающим состоянием стремится к нулю. Поскольку деформации от различных квантовых точек уменьшаются с увеличением расстояния медленнее, чем спадает интеграл перекрытия, то при больших расстояниях основную роль в расщеплении связывающего и антисвязывающего состояния будут играть именно деформации. Поскольку вклад подзон тяжелых и легких дырок, а так же спин орбитально отщепленной подзоны различается для связывающего и антисвязывающего состояния, то деформации на смещение этих уровней будут влиять по разному. В германии двуосные деформации положительны, поэтому подзона тяжелых дырок смещается вглубь потенциальной ямы. Волновая функция антисвязывающего состояния содержит большую часть тяжелых дырок, чем волновая функция связывающего состояния. Поэтому антисвязывающее состояние оказывается глубже по энергии, чем связывающее.

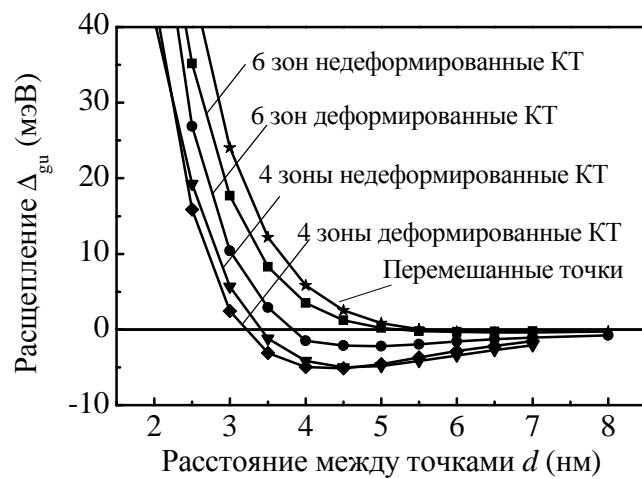


Рис. 4.8. Расщепление между связывающей и антисвязывающей орбиталью $\Delta_{gu} = E_g - E_u$, рассчитанное в рамках 6-ти зонного и 4-х зонного приближения. Результаты расчета расщепления в квантовых точках на основе твердого раствора $\text{Ge}_{0.7}\text{Si}_{0.3}$ показаны звездочками

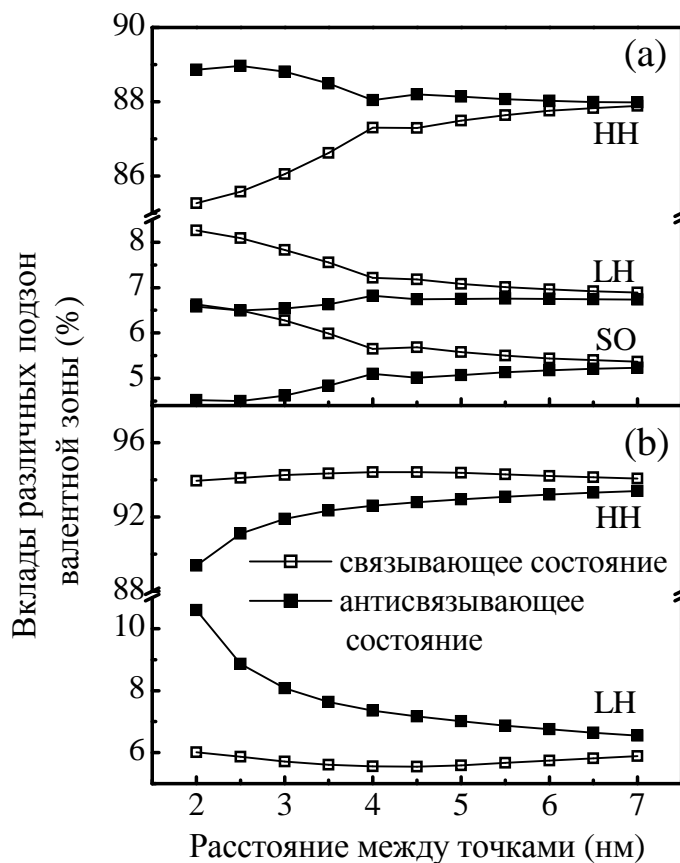


Рис. 4.9. Вклад подзон тяжелых дырок (HH), легких дырок (LH), а так же дырок, соответствующих подзоне, отщепленной спин-орбитальным взаимодействием (SO), в волновую функцию дырки, рассчитанные в 6-ти зонном (а), и 4-х зонном (б) $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -приближении с учетом неоднородного распределения упругих деформаций.

Для выяснения причины большей доли тяжелых дырок в волной функции антисвязывающего состояния рассмотрим относительные вклады различных подзон вдоль вертикальной оси симметрии структуры, содержащей одну квантовую точку (рис. 4.10). Из данного рисунка видно, что внутри Ge островка преобладает подзона тяжелых дырок, однако при удалении от островка доля подзоны легких дырок начинает доминировать, а доля подзоны тяжелых дырок спадать. Иными словами легкие дырки и дырки, соответствующие подзоне, отщепленной спин-орбитальным взаимодействием, значительно легче проникают в барьер, разделяющий Ge островки. Связывающая дырочная орбиталь характеризуется волновой функцией, не имеющей нулей, поэтому волновая функция дырки в барьере во всех точках пространства имеет конечное значение. Антисвязывающее состояние характеризуется волновой функцией, имеющей один ноль, поэтому в кремниевом барьере, разделяющем квантовые точки существует область пространства в которой волновая функция антисвязывающего состояния обращается в ноль или бесконечно мала. Таким образом доля волновой функции в барьере в случае антисвязывающего состояния меньше, чем в случае связывающего. Как следствие меньшей доли антисвязывающего состояния дырки в барьере доля легких дырок и дырок, соответствующих подзоне, отщепленной спин-орбитальным взаимодействием, в антисвязывающем состоянии меньше, чем в связывающем. Поэтому доля волновой функции связывающего состояния в кремнии выше, чем в случае антисвязывающего состояния.

Для дополнительного подтверждения данных предположений, мы провели расчет в рамках 6-ти зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -метода для квантовых точек состоящих из твердого раствора $\text{Ge}_{0.7}\text{Si}_{0.3}$. Упругие напряжения в таком твердом растворе релаксированы по сравнению со случаем чистого Ge. На рис 4.8 показан данный результат. Как и ожидалось, величина расщепления связывающего и антисвязывающего состояния сильно

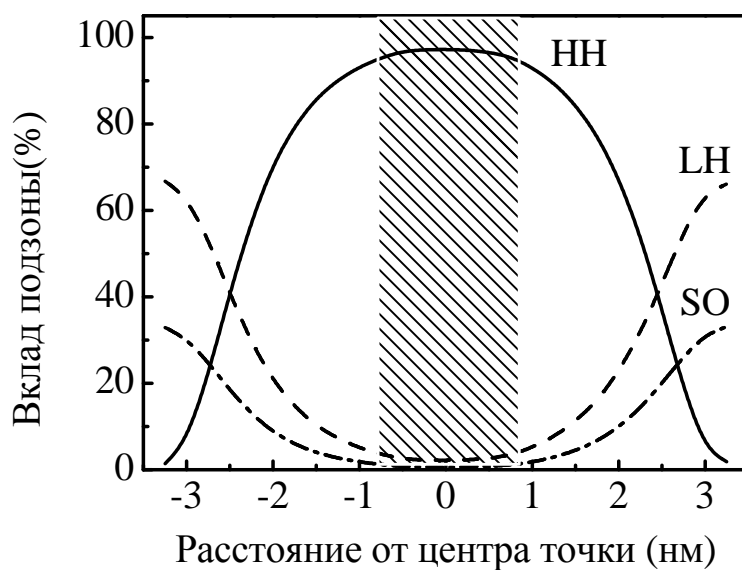


Рис. 4.10. Пространственное распределение вкладов подзон тяжелых дырок (HH), легких дырок (LH), а так же подзоны, отщепленной спин-орбитальным взаимодействием (SO) в волновую функцию дырки, в основном состоянии одиночной квантовой точки. Профиль распределения взят вдоль вертикальной оси симметрии z . Заштрихованные области соответствуют Ge нанокластеру и смачивающему слою.

4.2. Двухчастичные дырочные состояния в двойных квантовых точках

уменьшена по сравнению со случаем чистого Ge, а эффект смены симметрии основного состояния сильно смазался из-за перемешивания.

4.2 Двухчастичные дырочные состояния в двойных квантовых точках

4.2.1 Энергетический спектр и волновые функции двух дырок, локализованных в двойных квантовых точках

Двойные квантовые точки рассматриваются как перспективный вариант для осуществления квантовых вычислений. Для осуществления логических операций для квантовых вычислений необходимо перепутывание двух кубитных состояний. Двойная квантовая точка, представляет собой систему, в которой такое перепутывание реализуется. Лосс и ДеВинченцо [6] предложили вариант, в котором операции с двумя кубитами (спинами носителя заряда) реализуются путем управления обменным взаимодействием в двойной квантовой точке, которое характеризуется расщеплением синглет-триплет для двух носителей заряда в квантовой точке. Некоторые важные аспекты локализации двух электронов в двойной квантовой точке, расщепления синглет-триплет, корреляции в их движении, а так же перепутывании электронных состояний были обсуждены в статьях [75, 76, 100, 101].

Основное требование к системе состоит в том, чтобы время спиновой релаксации было больше, чем время совершения логической операции. До сих пор вопросам спиновой динамики электронов уделялось значительно больше внимания, поскольку теоретические основы решения двухэлектронной задачи значительно более развиты, нежели для дырок. Однако, сверхтонкое взаимодействие спинов электронов с пространственно неоднородно распределенными ядерными спинами приводит к быстрой спиновой декогеренции (см. [102] и ссылки в ней). Поскольку взаимодействие носителей заряда в валентной

зоне с ядерными спинами значительно слабее, чем в случае зоны проводимости, дефазировка дырочного спина может происходить значительно медленнее [103], чем электрона. При этом могут проявляться другие особенности дырочной спиновой релаксации, по сравнению с электронной спиновой релаксацией [104]. Более того, как было показано [105], проблема когерентного управления спином дырки может быть обойдена путем использования техники дипольного спинового резонанса, вместо традиционной техники электронного спинового резонанса. Поэтому система из двух дырок, локализованных в двойной квантовой точке привлекает дополнительное внимание. Из-за наличия спин-орбитального взаимодействия в валентной зоне задача локализации двух дырок в двойной квантовой точке более комплексная, чем электронная. Спин-орбитальное взаимодействие связывает дырочный орбитальный момент \mathbf{L} и дырочный спин \mathbf{S} , таким образом, что ни спин, ни орбитальный момент не являются хорошим квантовым числом для дырочного состояния. Поэтому дырочное состояние характеризуется полным угловым моментом $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Состояния валентной зоны обладают орбитальным моментом $L = 1$, что дает $J = \frac{3}{2}$ или $J = \frac{1}{2}$. Дырочные состояния $|\frac{3}{2}; \pm\frac{3}{2}\rangle$ и $|\frac{3}{2}; \pm\frac{1}{2}\rangle$ описывают подзоны тяжелых и легких дырок соответственно. Состояние $|\frac{1}{2}; \pm\frac{1}{2}\rangle$ соответствует подзоне, отщепленной спин-орбитальным взаимодействием. Здесь состояния $|J; J_z\rangle$ это состояния с полным моментом J и его проекцией на ось z - J_z . В первых параграфах данной главы было показано, что главенствующий вклад в формирование основного состояния дырок вносит подзона тяжелых дырок $|\frac{3}{2}; \pm\frac{3}{2}\rangle$. Вклад данной подзоны составляет 85–90% для основного первого возбужденного состояния. Вклад подзон легких дырок и спин-орбитально отщепленной подзоны не превышает 15% в сумме, однако данный вклад может существенно изменять симметрию основного состояния.

В случае двух электронной задачи спин-орбитальным взаимодей-

ствием можно пренебречь. Поэтому волновая функция двух электронов может быть представлена как чистый спиновый синглет, либо чистый спиновый триплет, так как спиновая и пространственная часть волновой функции электронов независимы. В случае дырок данное утверждение уже не верно и такое разделение невозможно. Однако для дырочных состояний мы можем использовать проекцию углового момента J_z в качестве аналога электронного спина (так называемый эффективный спин или псевдоспин). Поэтому дырочные состояния мы можем классифицировать как псевдоспиновый синглет и псевдоспиновый триплет. Поскольку взаимодействие дырочных псевдоспинов абсолютно аналогично взаимодействию электронных спинов [106], то все квантовые вычисления, которые могут быть реализованы с помощью электронов, реализуются с помощью дырок.

Волновая функция состояния двух дырок в рамках метода конфигурационного взаимодействия представляется в виде линейной комбинации базисных функций. Базисные волновые функции метода конфигурационного взаимодействия представляют собой прямые произведения одночастичных волновых функций дырок. Принцип Паули для дырок соблюдается на этапе формирования прямых произведений, тем самым двухчастичная волновая ищется в виде, удовлетворяющем принципу Паули уже на этапе построения базисных функций. Для определения коэффициентов разложения волновых функций по этому базису, а так же энергии связи дырок в данном состоянии гамильтониан метода конфигурационного взаимодействия, записанный в терминах вторичного квантования диагонализуются. Собственные числа матрицы гамильтониана - это энергии связи дырок, а собственные вектора это коэффициенты разложения волновых функций дырок по базису.

На первом этапе рассмотрим эффекты возникающие при помещении двух дырок в двойную квантовую точку, учитывая только подзону

тяжелых дырок. При таком рассмотрении спин-орбитальным взаимодействием в валентной зоне можно пренебречь, и рассматривать состояния дырок как чисто спиновый синглет и спиновый триплет. В этом случае дырки представляют собой полный аналог электронов, поэтому такой подход можно использовать в качестве реперного при анализе спектра в случае многокомпонентных волновых функций. Основное состояние двух дырок в двойной квантовой точке синглет $1\Sigma_g^{(a)}$, первое возбужденное - триплет $3\Sigma_u$, следующие возбужденные состояния это синглеты $1\Sigma_u$ и $1\Sigma_g^{(b)}$. В рамках данной работы будут рассмотрены только первые два состояния.

На рис. 4.11(d) представлено расщепление синглет-триплет J_{ST} а так же расщепление связывающего и антисвязывающего состояния Δ_{gu} , как функция расстояния между квантовыми точками. Из рисунка видно, что с увеличением расстояния между квантовыми точками расщепление синглет-триплет спадает экспоненциальным образом. Точно так же ведет себя расщепление связывающего и антисвязывающего состояния. Численный анализ показывает следующие зависимости: $\Delta_{gu} = 1.03 \exp(-d/0.51)$ эВ и $J_{ST} = 0.22 \exp(-d/1.34)$ эВ.

Зависимость главных интегралов метода конфигурационного взаимодействия представлена на рис.4.11(b). Здесь под V_{gg} понимается энергия кулоновского взаимодействия двух дырок, находящихся в связывающем состоянии, V_{gu} и K_{gu} описывают кулоновское и обменное взаимодействие в случае, когда одна из дырок находится в связывающем состоянии, а вторая в антисвязывающем. Поскольку энергии V_{gg} и V_{uu} одинаковы, то на рисунке приведен только интеграл V_{gg} . С увеличением расстояния между квантовыми точками, ожидалось увеличение энергии обменного взаимодействия и уменьшение энергии кулоновского взаимодействия [76, 107]. Данное поведение интегралов кулоновского и обменного взаимодействия видно из рисунков.

На рисунке 4.11 (c) представлено разложение двухчастичной волно-

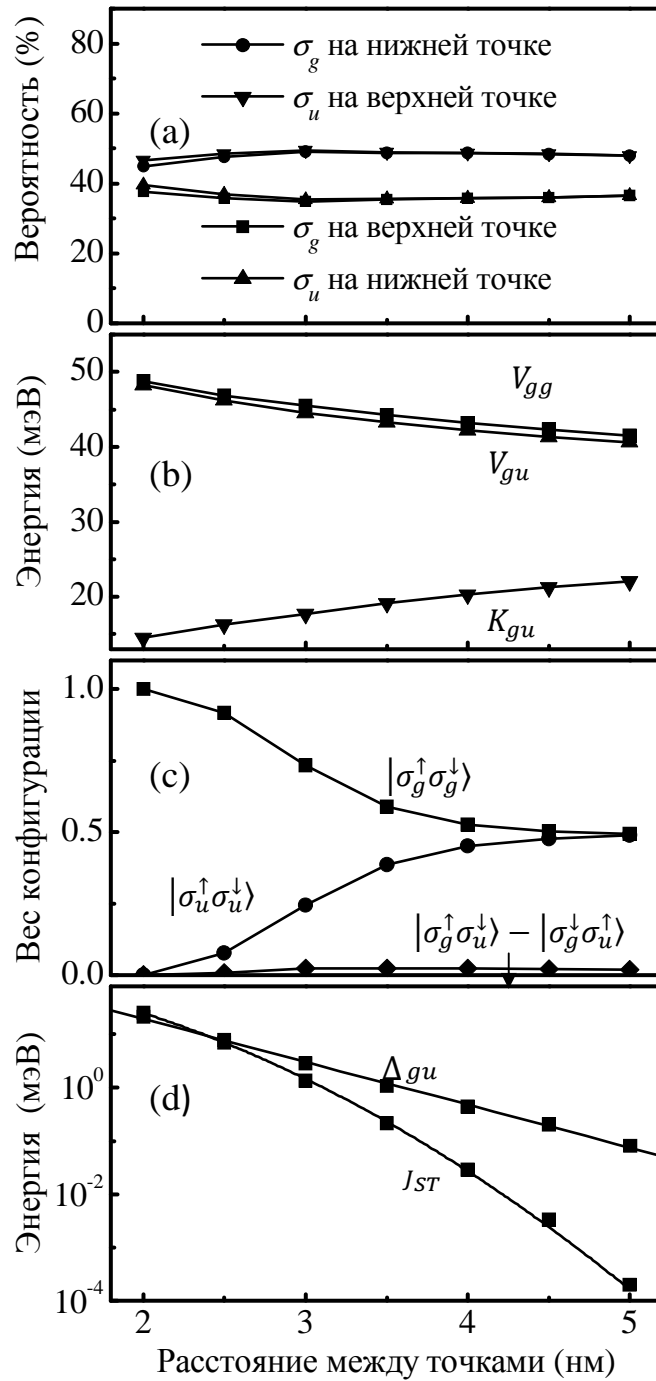


Рис. 4.11. Вероятность найти дырку на верхней или на нижней точке в связывающем σ_g или антисвязывающем σ_u состоянии (a). Энергии кулоновского V_{gg} и V_{gu} и обменного K_{gu} взаимодействия полученные с помощью выражения 2.28 (b). Разложение двухчастичной волновой функции по базисным функциям метода конфигурационного взаимодействия (c). Расщепление синглет-триплет $J_{ST} = E(^3\Sigma_u) - E(^1\Sigma_g^{(a)})$ и связывающее-антисвязывающее состояние $\Delta_{gu} = E_u - E_g$ (d) Сплошные линии на панели (d) аппроксимируют данные с помощью выражений $\Delta_{gu} = 1.03 \exp(-d/0.51)$ эВ и $J_{ST} = 0.22 \exp(-d/1.34)$ эВ. . Представленные результаты рассчитаны в однозонной модели.

вой функции дырки по базису метода конфигурационного взаимодействия. Из рисунка видно, что при больших расстояниях между квантовыми точками волновая функция дырок содержит конфигурации $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ и $|\sigma_u^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle$ в равных пропорциях. Так же в волновой функции дырок есть небольшая добавка от конфигурации $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_u^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$. Вследствие такой конфигурации волновой функции дырок дырки локализируются на противоположных квантовых точках из-за кулоновского взаимодействия. При уменьшении расстояния между квантовыми точками возрастает доля конфигурации $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$. Т. е. основное состояния дырки настолько сильно отстоит от первого возбужденного, что двум дыркам выгодно полностью заполнить основное состояние.

На следующем этапе рассмотрение многочастичной задачи проводилось в рамках многозонной модели. Одночастичные волновые функции дырок рассчитывались в рамках 6-ти зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ приближения. На рисунке 4.12 представлена зависимость расщепления синглет-триплет от расстояния между квантовыми точками для квантовых точек размером 10, 15 и 20 нм. Дополнительно на рисунке указано расщепление уровней связывающей и антисвязывающей дырочной орбитали. Видно, что при больших расстояниях между квантовыми точками поведение параметров Δ_{gu} и J_{ST} различается. Расщепление синглет-триплет уменьшается с увеличением размера точки, в то время как расщепление Δ_{gu} остается практически постоянным. Обменная энергия определяется двумя параметрами: кулоновским взаимодействием и туннелированием дырок между квантовыми точками. Поскольку при увеличении размера квантовой точки, туннелирование подавляется, вследствие увеличения энергии связи дырки, в квантовой точке, то уменьшается так же и энергия расщепления синглет-триплет J_{ST} . В то же время энергия расщепления Δ_{gu} определяется в основном асимметрией распределения деформационных полей. Таким образом она значительно слабее зависит от размера квантовых точек. Другая карти-

на наблюдается в области малых расстояний между квантовыми точками. Здесь поведение расщеплений Δ_{gu} и J_{ST} обуславливается двумя конкурирующим эффектами. С одной стороны увеличение высоты пирамиды (размера основания) приводит к уменьшению эффективной толщины потенциального барьера, разделяющего квантовые точки (Напомним, что расстояние между нанокластерами считается от смачивающего слоя до смачивающего слоя), увеличивая таким образом перекрытие орбиталей дырок, локализованных на отдельных квантовых точках. С другой стороны, увеличение размера основания квантовых точек увеличивает энергия связи дырок, что приводит к тому, что проникновение волновой функции дырки в барьер уменьшается, уменьшая таким образом перекрытие волновых функций дырок, локализованных на отдельных квантовых точках. Таким образом слабая зависимость Δ_{gu} и J_{ST} от размера квантовых точек есть результат такой конкуренции.

Кроме того, вблизи точки смены симметрии основного одночастичного состояния d_c наблюдаются особенности в спектре двухчастичных состояний. Поскольку эти особенности не наблюдаются в однозонной модели и не проявлялись в двухчастичном спектре электронных состояний, то их можно считать аномальными. Обнаружено:

- При расстояниях между квантовыми точками, при которых происходит смена симметрии основного одночастичного состояния, двухчастичные состояния синглета и триплета вырождаются (рис. 4.12). Такое поведение можно интерпретировать как “выключение” обменного взаимодействия. Поскольку смены симметрии основного состояния дырки и вырождение синглет-триплет происходят в одной точке, то можно предположить, что эти явления имеют одинаковую природу.
- За исключением области $d \sim d_c$ основное двухчастичное состояние это синглет $^1\Sigma_g^{(a)}$, первое возбужденное - триплет $^3\Sigma_u$. Одна-

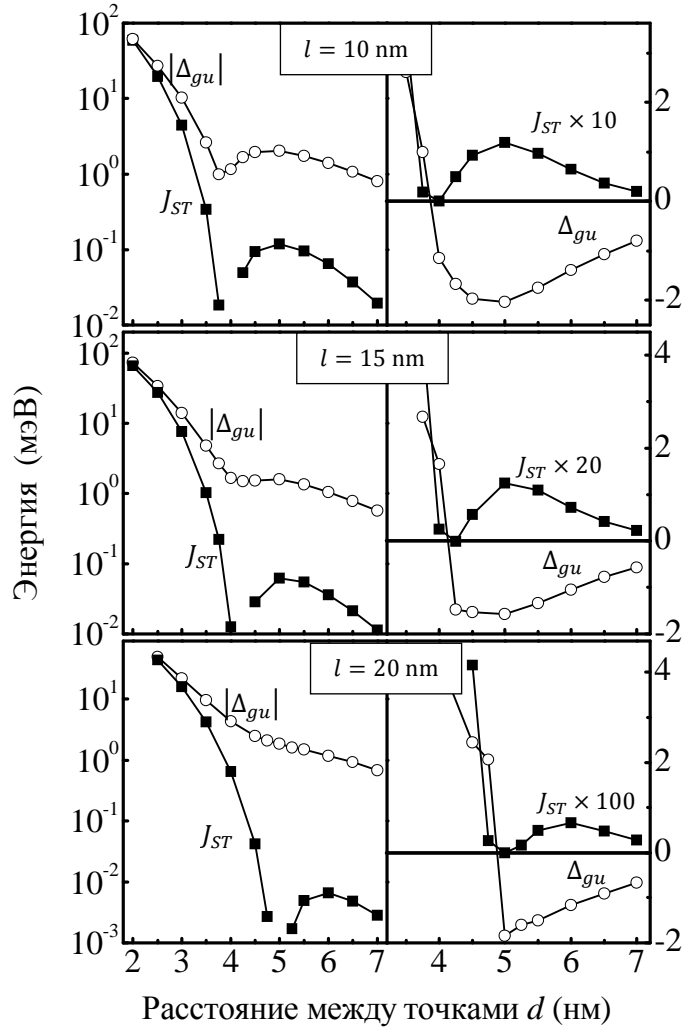


Рис. 4.12. Расщепление синглет-триплет $J_{ST} = E(^3\Sigma_u) - E(^1\Sigma_g^{(a)})$ и связывающее-антисвязывающее состояние $\Delta_{gu} = E_u - E_g$, построенные в полулогарифмическом масштабе (левая половина) и в линейном масштабе (правая половина), как функция расстояния между нанокластерами d и размера основания нанокластера l . На левой вкладке показано абсолютное значение расщепления Δ_{gu} . Минимумы соответствуют смене симметрии основного одночастичного состояния и вырождению двухчастичных.

ко характер синглета ${}^1\Sigma_g^{(a)}$ сильно различен при различных расстояниях между квантовыми точками. При малых расстояниях между нанокластерами основной вклад в волновую функцию двух дырок дает прямое произведение делокализованных молекулярных орбиталей $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$. При больших d , когда основное состояние дырки становится антисвязывающим, волновая функция синглета ${}^1\Sigma_g^{(a)}$ содержит вклады детерминантов Слэйтера $|\sigma_u^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle$ и $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$. При этом вклад $|\sigma_u^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle$ доминирует. Вблизи $d = d_c$ вклады $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ и $|\sigma_u^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle$ исчезают и волновая функция становится чистым $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_u^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ состоянием.

- Энергия кулоновского взаимодействия двух дырок находящихся на одной орбитали σ_g или σ_u (V_{gg} или V_{uu}) увеличивается вблизи d_c в то время как энергия кулоновского взаимодействия и энергия обменного взаимодействия дырок локализованных на орбиталях σ_g и σ_u (V_{gu} и K_{gu}) имеют минимум в точке смены симметрии основного состояния (рис .4.13(б)). Обменный интеграл K_{gu} уменьшается практически до нуля.

Для интерпретации вырождения состояний синглета и триплета вблизи d_c рассмотрим приближение одной конфигурации, которое заключается в игнорировании взаимодействия конфигураций между собой. Такое приближение допустимо, поскольку при $d = d_c$ состояние синглета ${}^1\Sigma_g^{(a)}$ это чистое состояние $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_u^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ (рис. 4.13). В рамках приближения одной конфигурации двухчастичная задача имеет простое аналитическое решение:

$$E({}^1\Sigma_g^{(a)}) = E_g + E_u + V_{gu} + K_{gu}, \quad (4.7)$$

для состояния синглета $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_u^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ и

$$E({}^3\Sigma_u) = E_g + E_u + V_{gu} - K_{gu}, \quad (4.8)$$

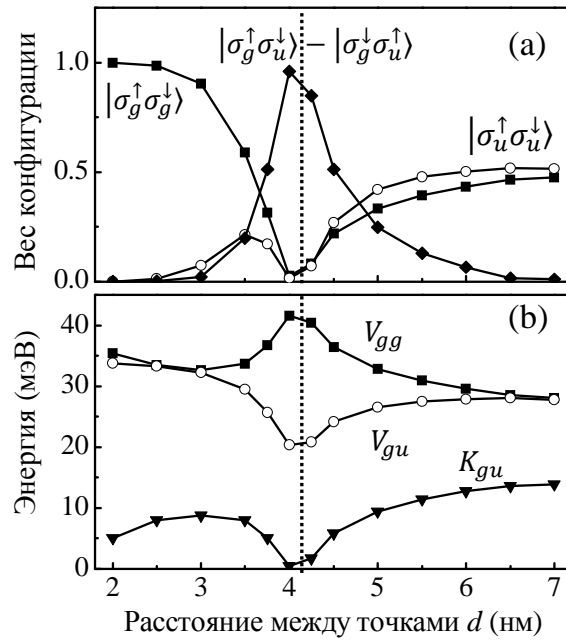


Рис. 4.13. Разложение по базисным функциям метода конфигурационного взаимодействия двухчастичной волновой функции в состоянии синглета $^1\Sigma_g^{(a)}$ (a). Энергии кулоновского V_{gg} и V_{gu} и обменного взаимодействия K_{gu} (b). Вертикальные прерывистые линии показывают обозначают расстояние d_c при котором происходит смена симметрии основного состояния. Данные получены в рамках 6-ти зонной $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -модели с учетом неоднородного распределения упругих деформаций для квантовых точек с размером основания $l = 15$ нм.

для состояний триплета ${}^3_+\Sigma_u$, ${}^3_-\Sigma_u$ и ${}^3_0\Sigma_u$. Исходя из вышеприведенных выражений, расщепление синглет-триплет определяется формулой

$$J_{ST} = E({}^1\Sigma_g^{(a)}) - E({}^3\Sigma_u) = 2K_{gu}. \quad (4.9)$$

Из-за антисимметричности волновой функции относительно перестановки частиц, расщепление между состояниями синглета $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_u^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ и триплета $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle + |\sigma_u^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ это удвоенная энергия обменного взаимодействия. Поэтому результат 4.9 получает простую интерпретацию. При $d = d_c$ обменное взаимодействие подавлено, поэтому $J_{ST} \rightarrow 0$.

Теперь рассмотрим причину подавления обменного взаимодействия K_{gu} и доминирование конфигурации $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_u^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ в точке кроссинга одночастичных состояний. Основная причина такого радикально отличия в энергетическом спектре дырок по сравнению с электронами заключается во влиянии неоднородного распределения упругих деформаций на одночастичные дырочные состояния. Важным обстоятельством является тот факт, что вблизи d_c основное состояние дырки (σ_g или σ_u в зависимости от расстояния) оказывается локализованным в нижней квантовой точке, в то время как первое возбужденное состояние локализуется в верхней квантовой точке (рис. 4.14(a)). Асимметрия распределения упругих напряжений, обусловленная наличием второй точки приводит к тому, что геометрически эквивалентные квантовые точки, становятся неэквивалентными потенциальными ямами для дырок [75, 108–111]. Двусные деформации в нижней квантовой точке выше, чем в верхней рис. 4.3. Такая асимметрия приводит к сильной локализации основного состояния дырки в нижней квантовой точке и различию в энергии связи дырки, локализованной в верхней или нижней точке (см. рис. 4.15). В однозонном приближении такая асимметрия не наблюдается (см. рис. 4.11 (a))

Энергии связи дырки на верхней e_T или нижней e_B квантовой точке может быть определена путем перехода от базиса молекулярных

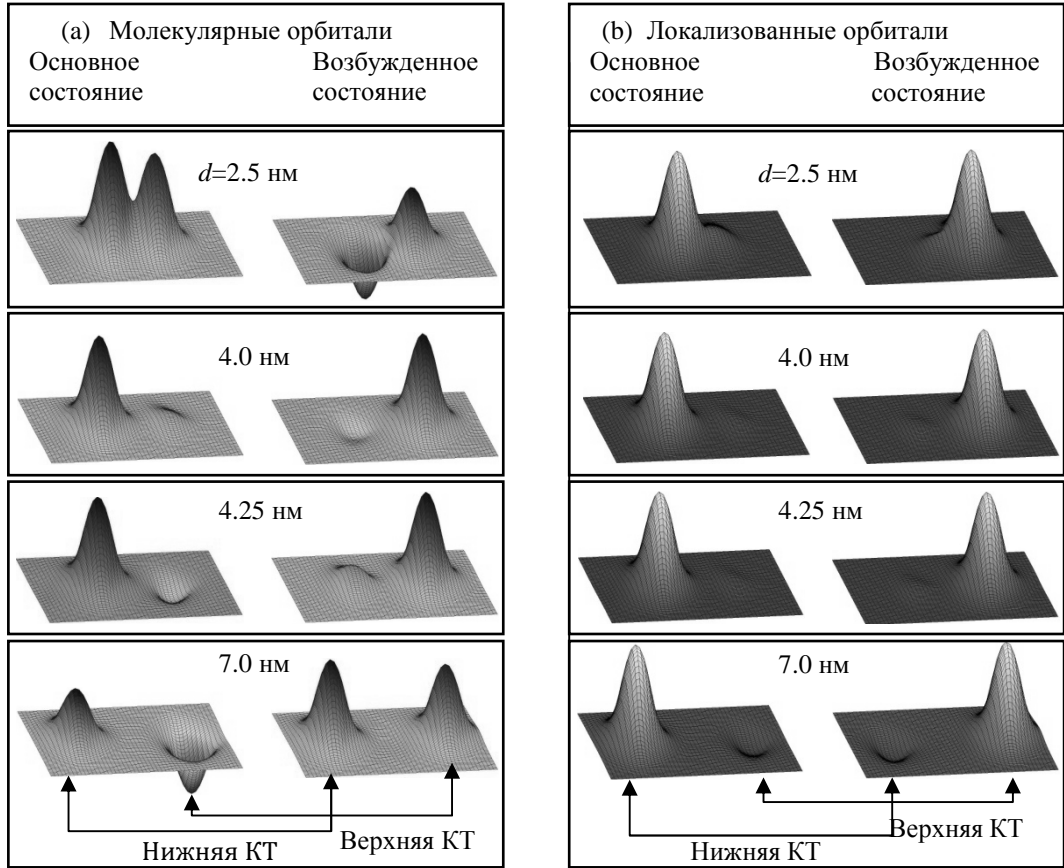


Рис. 4.14. Пространственное распределение волновых функций дырок для одночастичных молекулярных орбиталей (а), и для одночастичных орбиталей, локализованных на точках (б) в плоскости yz . Ось z совпадает с вертикальной осью симметрии структуры. Приведена компонента волновой функции $|\frac{3}{2}; -\frac{3}{2}\rangle$ для размера квантовой точки $l = 15$ нм. Волновые функции в базисе орбиталей, локализованных на точках получены унитарным преобразованием базиса молекулярных орбиталей (см 4.10). Видно, что при изменении расстояния между квантовыми точками от 4 нм до 4.25 нм, происходит смена симметрии основного состояния дырки и дырки в основном и первом возбужденном состоянии локализуются на противоположных точках.

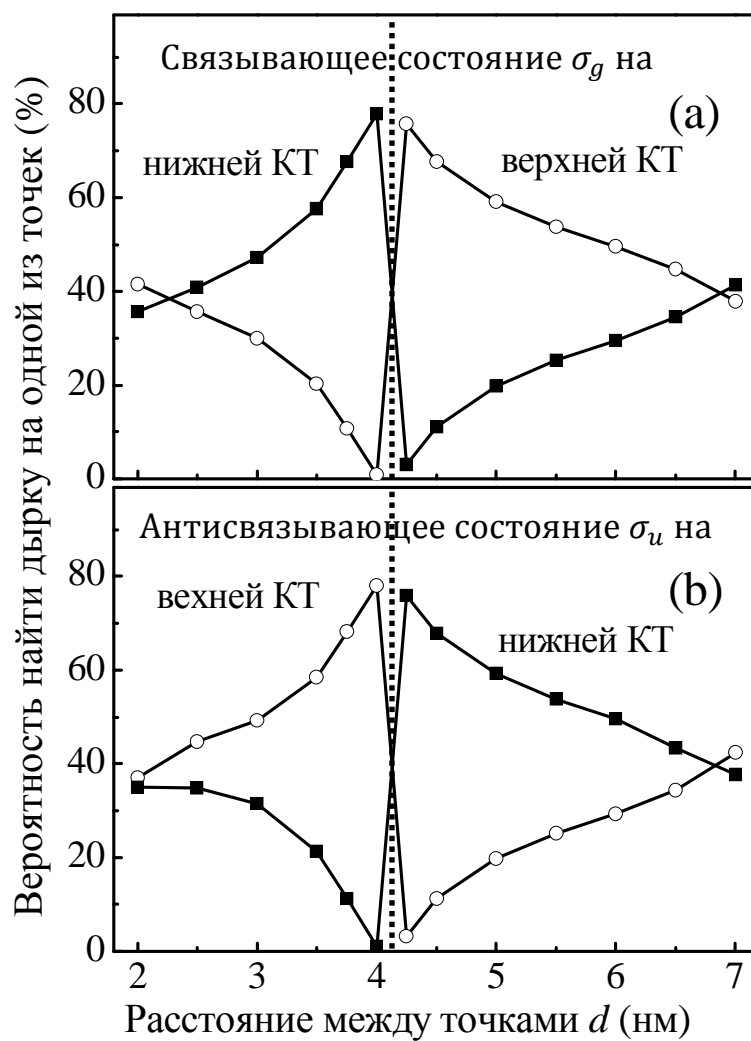


Рис. 4.15. Вероятность обнаружить дырку на нижней или верхней квантовой точке в связывающем (а) и антисвязывающем (b) состоянии. Размер основания квантовой точки $l = 15$ нм. Разные цвета соответствуют областям с различной симметрией основного состояния дырки.

орбиталей к базису орбиталей локализованных на точках [75, 76]. Переход к базису орбиталей, локализованных на квантовых точках ϕ_η может быть осуществлен с помощью унитарного преобразования базиса молекулярных орбиталей ψ_i :

$$\phi_\eta = \sum_i U_{\eta i} \psi_i, \quad (4.10)$$

где $U_{\eta i}$ - унитарные матрицы такого преобразования, выбранные таким образом, чтобы максимизировать кулоновскую энергию взаимодействия двух дырок локализованных на одной и той же орбитали. После выбора матриц $U_{\eta i}$ мы можем сразу же написать выражения для энергии связи дырки на орбитали в новом базисе:

$$e_\eta = \sum_i U_{\eta i}^* U_{\eta i} E_i, \quad (4.11)$$

где E_i энергия локализации дырки на i -той молекулярной орбитали. На рисунке 4.16 представлена зависимость расщепления между двумя низшими энергетическими уровнями в двойной квантовой точке e_T и e_B в базисе Ванье, для квантовых точек различного размера. Для сравнения на график также был нанесен результат полученный в однозонной модели. Из графика видно, что при уменьшении расстояния между квантовыми точками происходит нарастание δ . Так же δ очень сильно увеличивается при увеличении размера квантовых точек из-за увеличения асимметрии деформационных полей. В то же время асимметрия распределения упругих деформаций в однозонной модели влияет на δ значительно слабее, чем в шестизонной.

Возможное объяснение того факта, что в шестизонной модели влияние асимметрии упругих деформаций выше, чем в однозонной состоит в следующем: Под влиянием упругих деформаций смещение подзон валентной зоны может быть описано с помощью выражения 4.4. Если дырочное состояние формируется только из состояний подзоны тяжелых дырок, то положение энергетического уровня представляет собой

линейную функцию двуосных деформаций внутри квантовой точки. Более сложным такое поведение становится, когда мы учитываем подмешивание подзон легких дырок и спин-орбитально отщепленной подзоны. Двуосные деформации приводят к расщеплению подзон тяжелых дырок и легких дырок, а так же к сдвигу подзоны отщепленной спин-орбитальным взаимодействием. В результате увеличивается доля тяжелых дырок в волновой функции дырочного состояния, а доля легких дырок и дырок, отщепленных спин-орбитальным взаимодействием уменьшается с увеличением напряжений. Таким образом получается, что энергия дырочного состояния зависит от напряжений по сверхлинейному закону. Поэтому асимметрия распределения упругих деформаций приводит к большему расщеплению энергий связи дырок локализованных на различных точках в случае шестизонного приближения, чем в случае однозонного. На рис. 4.17 представлена изменение энергии связи дырки на верхней квантовой точке e_T , как функция максимума двуосной деформации $\varepsilon_b^{Ge}(T)$ в верхней точке для однозонного и многозонного приближения. Из рисунка видно, что сдвиг энергии связи в однозонном приближении изменяется практически линейно, а в шестизонном приближении сверхлинейно, что подтверждает приведенное объяснение.

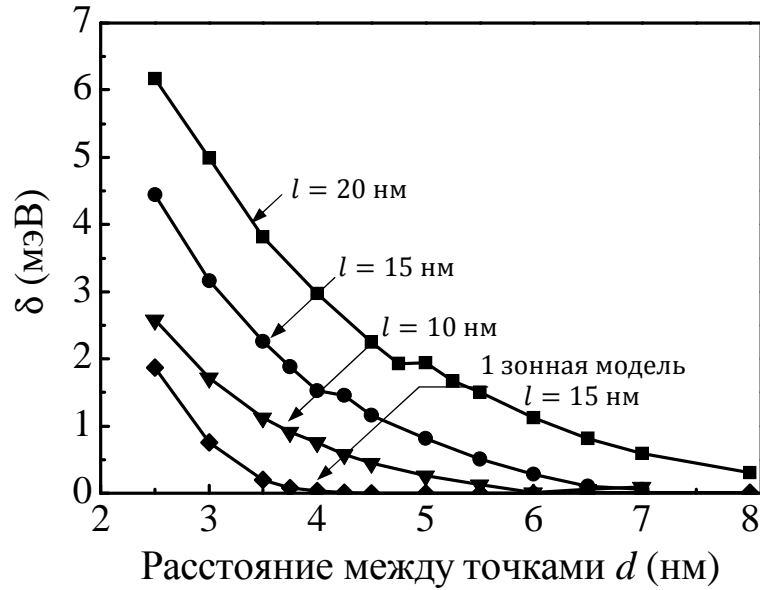


Рис. 4.16. Расщепление между одночастичными состояниями дырки на верхней e_T или нижней e_B квантовой точке $\delta = e_T - e_B$, рассчитанные в рамках 6-ти зонной $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ модели для точек размером $l = 10$ нм, $l = 15$ нм и $l = 20$ нм и однозонной модели для точек размером $l = 15$ нм. Результаты получены с помощью уравнения 4.11

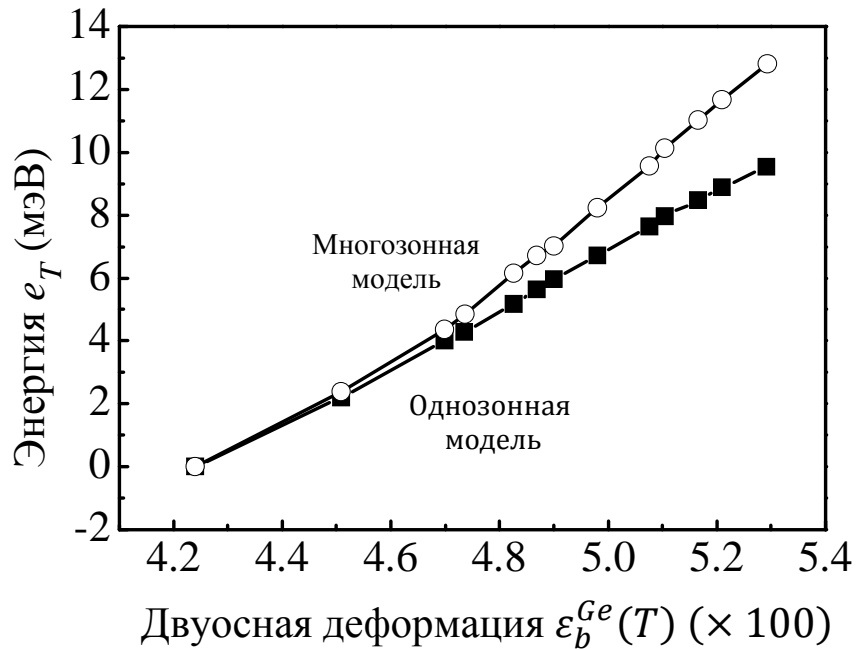


Рис. 4.17. Изменение положения уровня дырки в верхней точке под влиянием деформации рассчитанный в однозонной и многозонной модели для точек размером $l = 15$ нм. Энергии рассчитаны относительно значения e_T при $d = 2.5$ нм.

В простейшем случае двух неэквивалентных квантовых точек расщепление между ними будет описываться выражением $\Delta_{gu} = \sqrt{\delta^2 + \Delta_T^2}$. В области слабого перекрытия разница между уровнями, обусловленная асимметрией распределения упругих деформаций превышает интеграл перекрытия волновых функций дырок. Поэтому дырки оказываются локализованными на противоположных точках. При больших расстояниях между квантовыми точками интеграл перекрытия и асимметрия деформаций спадают до нуля, что приводит к исчезновению асимметрии волновых функций дырок.

Таким образом вблизи критического расстояния d_c локализация одночастичных волновых функций дырок приводит к тому, перекрестные интегралы V_{gu} и K_{gu} имеют минимум, так как дырки в состояниях σ_g и σ_u локализованы на различных квантовых точках. В то же время интегралы V_{gg} и V_{uu} , которые описывают взаимодействие дырок находящихся на одной орбитали увеличиваются из-за уменьшения размера волновой функции дырки. Кроме того в точке смены симметрии основного одночастичного состояния, орбитали σ_g и σ_u вырождены. В этом случае волновая функция дырки формируется таким образом, чтобы уменьшить кулоновское отталкивание. В этом случае конфигурация синглета ${}^1\Sigma_g^{(a)} = |\phi_B^\uparrow; \phi_T^\downarrow\rangle - |\phi_T^\uparrow; \phi_B^\downarrow\rangle$. Поскольку в точке кроссинга одночастичных состояний базисы молекулярных орбиталей и орбиталей локализованных на точках практически совпадают, то комбинация $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_u^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ в базисе молекулярных орбиталей есть не что иное как комбинация $|\phi_B^\uparrow; \phi_T^\downarrow\rangle - |\phi_T^\uparrow; \phi_B^\downarrow\rangle$ в базисе орбиталей локализованных на квантовых точках.

Для дальнейшего детального исследования пространственной симметрии волновых функций двух дырок, локализованных в двойной квантовой точке, рассмотрим парные корреляционные функции основного состояния ${}^1\Sigma_g^{(a)}$ в приближении одной конфигурации и в приближении взаимодействующих конфигураций. Парная корреляцион-

ная функция представляет собой вероятность найти вторую дырку в точке пространства с координатами r , в то время как первая дырка локализована в точке пространства с координатами r_0 . Иными словами $\rho(r_0, r) = |\Psi(r_0, r)|^2$. На рис. 4.18 представлены парные корреляционные функции дырок в приближении взаимодействующих конфигураций (а) и в приближении одной конфигурации (б). Как и ожидалось, в приближении одиночной конфигурации многочастичные состояния не содержат никаких пространственных корреляций в движении двух дырок: вторая дырка стремится локализоваться в нижней точке, независимо от расположения первой дырки. Заметим, что в приближении одной конфигурации наиболее глубокое состояние синглета соответствует конфигурации $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ при расстояниях $d < d_c$ и $|\sigma_u^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle$ при расстояниях $d > d_c$. Очевидно, что склонность двух дырок локализовываться в нижней квантовой точке обусловлена пространственной асимметрией одночастичных состояний вызванной упругими деформациями. В то же время в случае взаимодействующих конфигураций при увеличении расстояния между квантовыми точками дырки стремятся занять противоположные квантовые точки, демонстрируя таким образом проявление пространственных корреляций.

4.2.2 Вероятность двойного заполнения

Для того, чтобы оценить влияние асимметрии одночастичных волновых функций, вызванной неоднородным распределением упругих деформаций, на формирование двухчастичных состояний рассмотрим вероятность заполнения любой из квантовых точек двумя дырками. Для этого в базисе волновых функций локализованных на квантовых точках решим задачу о локализации двух дырок в двойной квантовой точке [75]. В качестве базиса локализованных орбиталей в этом случае выступают прямые произведения $|\phi_T^\uparrow; \phi_T^\downarrow\rangle$, $|\phi_B^\uparrow; \phi_B^\downarrow\rangle$, $|\phi_T^\uparrow; \phi_B^\downarrow\rangle$ и $|\phi_B^\uparrow; \phi_T^\downarrow\rangle$. Квадрат коэффициента разложения волновой функции в

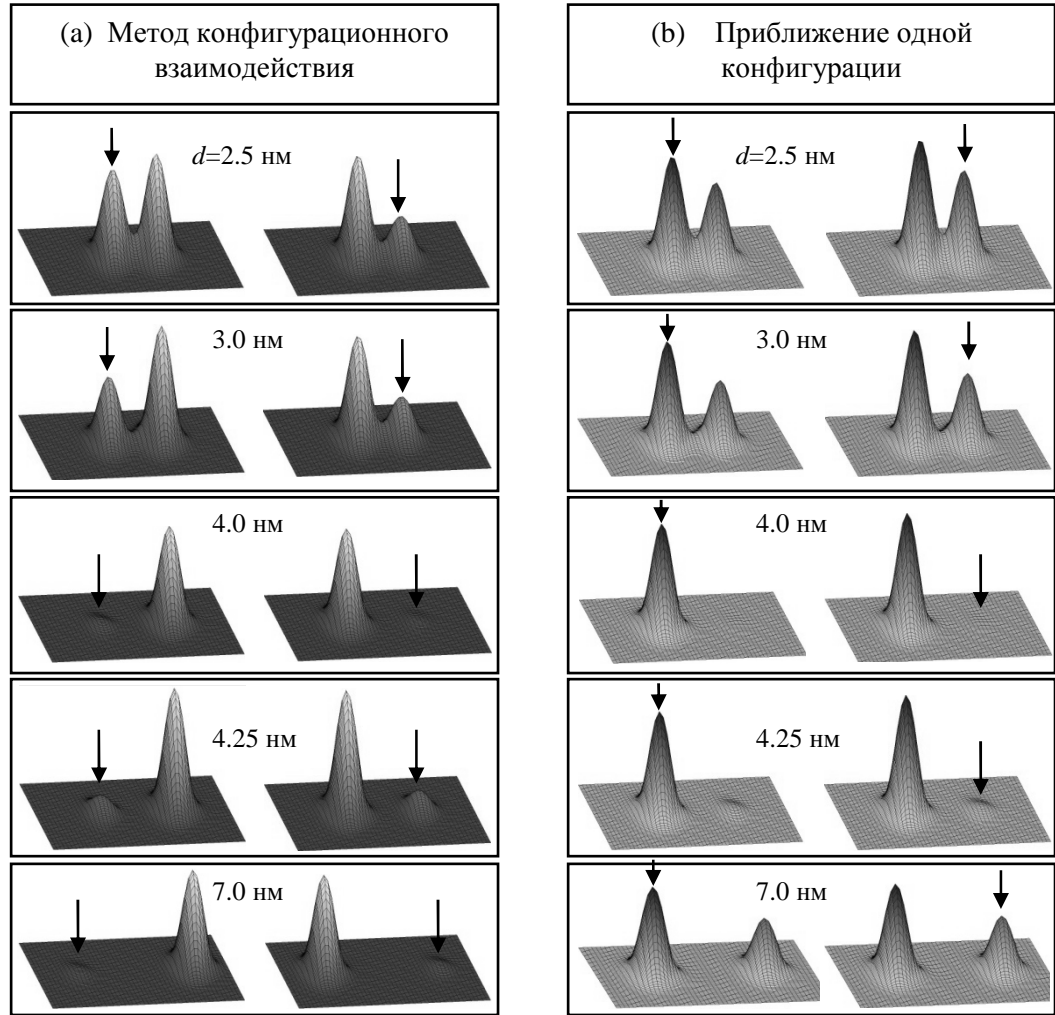


Рис. 4.18. Парные корреляционные функции синглета ${}^1\Sigma_g^{(a)}$ в приближении взаимодействующих конфигураций (а) и в приближении одной конфигурации (б) для нескольких расстояний между квантовыми точками размером $l = 15$ нм. На левой половине каждой из панелей первая дырка локализуется в точке максимума плотности заряда внутри нижней точки, а на правой локализация первой дырки происходит в точке максимума плотности заряда в верхней точке. Место локализации первой дырки указано с помощью стрелок. В приближении одной конфигурации основное состояние состоит из конфигурации $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ при $d < d_c$ и $|\sigma_u^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle$ при расстояниях $d > d_c$.

этом базисе перед конфигурацией $|\phi_T^\uparrow; \phi_T^\downarrow\rangle$ дает вероятность двойного заполнения верхней квантовой точки P_{TT} . Аналогичную вероятность для нижней квантовой точки P_{BB} дает вес детерминанта Слэйтера $|\phi_B^\uparrow; \phi_B^\downarrow\rangle$. На рис. 4.19 представлены результаты расчета полной вероятности двойного заполнения $P_{tot} = P_{TT} + P_{BB}$ для основного состояния синглета, полученную в рамках однозонного приближения (слабая асимметрия одночастичных волновых функций) и многозонного приближения (сильная асимметрия одночастичных волновых функций). При малых расстояниях между квантовыми точками оба приближения дают $P_{tot} \approx 0.4 - 0.5$, то есть две дырки делокализованы между квантовыми точками. При увеличении расстояния между квантовыми точками и в однозонном и в многозонном приближении вероятность двойного заполнения уменьшается. В отсутствие асимметрии волновых функций σ_g и σ_u или их слабой асимметрии, взаимодействие конфигураций $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$ и $|\sigma_u^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle$ приводит к разделению дырок на противоположных квантовых точках практически при любых d (кроме самых минимальных), что в свою очередь влечет за собой экспоненциальное падение вероятности двойного заполнения. В случае шестизонного приближения волновая функция дырки состоит из тяжелых дырок и малого вклада легких дырок и подзоны, отщепленной спинорбитальным взаимодействием. Эффективная масса состояния в этом случае меньше, чем масса тяжелой дырки, поэтому в случае 6-ти зонного приближения локализация второй дырки на противоположной квантовой точке происходит при больших d . В этом случае P_{tot} является более слабой функцией d , чем в однозонном случае. В то же время при $d = d_c$ синглет основного состояния состоит в основном из конфигурации $|\sigma_g^\uparrow; \sigma_u^\downarrow\rangle - |\sigma_u^\uparrow; \sigma_g^\downarrow\rangle$, при этом орбитали σ_g и σ_u локализуются на противоположных квантовых точках. Для такой конфигурации оба явления - пространственные корреляции и асимметрия волновых функций одновременно разводя дырки по противоположным кванто-

вым точкам, приводя к резкому минимуму в вероятности двойного заполнения.



Рис. 4.19. Вероятность локализации двух дырок на одной квантовой точке, P_{tot} , рассчитанная в рамках однозонной и многозонной модели для основного состояния синглета $^1\Sigma_g^{(a)}$ для квантовых точек размером $l = 15$ нм. Здесь $P_{tot} = P_{BV} + P_{TV}$, где P_{BV} (P_{TV}) вероятность локализации двух дырок на нижней (верхней) квантовой точке. Пунктирной линией выделено расстояние, при котором происходит смена симметрии основного состояния дырки.

Выводы к главе 4

В приближении сплошной среды в сочетании с методом конечных элементов рассчитано распределение упругих деформаций в гетероструктурах Ge/Si с двумя вертикально совмещенными квантовыми точками. Обнаружено, что при уменьшении расстояния между квантовыми точками проявляется асимметрия распределения упругих деформаций: а) одноосная деформация внутри нанокластеров в двойных квантовых точках релаксирует по сравнению со случаем одиночной квантовой точки; б) деформация внутри верхнего нанокластера релаксирована по сравнению с нижним нанокластером.

Установлено, что при уменьшении расстояния между нанокластерами средняя энергия дырки по связывающему и антисвязывающему состоянию уменьшается, вследствие частичной релаксации упругих деформаций.

Обнаружено, что при увеличении расстояния между квантовыми точками меняется симметрия основного состояния дырки. Основное состояние дырки становится антисвязывающим. Показано, что причиной смены симметрии основного состояния дырки является деформация внутри нанокластеров Ge.

Обнаружено, что при увеличении расстояния между квантовыми точками асимметрия распределения упругих деформаций приводит к локализации волновой функции дырки в основном состоянии на нижней квантовой точке, а в первом возбужденном на верхней.

Обнаружено, что в точке кроссинга одночастичных дырочных состояний обменная энергия двухчастичных состояний имеет минимум, а состояния синглета и триплета вырождаются. Показано, что оба явления - смена симметрии основного состояния дырки и вырождение двухчастичных состояний вызваны неоднородным распределением упругих деформаций.

Показано, что при увеличении расстояния между квантовыми точ-

ками кулоновское взаимодействие локализует дырки на противоположных квантовых точках.

При расстояниях между квантовыми точками соответствующих смене симметрии основного состояния дырки, как кулоновское взаимодействие, так и асимметрия упругих напряжений приводят к локализации дырок на противоположных квантовых точках, вероятность двойного заполнения при этом имеет резкий минимум.

Глава 5

ЭКСИТОНЫ В ДВОЙНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ Ge/Si

5.1 Моделирование экситонов в двойных квантовых точках

Поиск физических механизмов, позволяющих повысить эффективность излучательной рекомбинации и процессов межзонного поглощения света в непрямозонных полупроводниках, таких как кремний и германий, уже долгое время является одной из наиболее актуальных проблем физики полупроводников. Если бы удалось значительно увеличить силу осциллятора для межзонных переходов, это сделало бы возможным интеграцию на одной кремниевой подложке приборов опто- и микроэлектроники. Определенные надежды на решение этой проблемы возлагали на гетероструктуры Ge/Si с квантовыми точками, в которых ожидалось ослабление правил отбора по квазиимпульсу как следствие размерного ограничения движения носителей заряда во всех трех измерениях. Однако оказалось, что КТ Ge/Si(001) представляют собой гетероструктуры 2-го типа, в которых носители заряда разного знака разделены гетерограницей: дырки локализованы в областях, занятых Ge, а электроны находятся в делокализованных состояниях зоны проводимости слоев Si. Таким образом, межзонные переходы в

такой системе оказываются непрямыми не только в пространстве волновых векторов, но и в реальном пространстве.

Для того чтобы получить высокую эффективность оптических межзонных переходов (большое значение силы осциллятора) в структурах Ge/Si с квантовыми точками, необходимо решить следующие задачи: (1) Сформировать локализованные состояния электронов вблизи квантовых точек. Для локализованного состояния волновой вектор \mathbf{k} не является “хорошим” квантовым числом: состояние, локализованное в пространстве, можно представить как суперпозицию делокализованных состояний с различными волновыми векторами \mathbf{k} . В результате, межзонные переходы в такой системе станут прямыми в пространстве волновых векторов, поскольку средний импульс и электрона в связанном состоянии в зоне проводимости Si, и оставшейся в Ge дырки равны нулю. (2) Обеспечить максимальное перекрытие волновых функций локализованных электронов и дырок, и, следовательно, возможность прямых оптических переходов уже в реальном (геометрическом) пространстве. Фактически это условие означает, что дырка должна проникать из Ge в Si, а электрон из Si в Ge. В работе [112] были найдены условия формирования локализованных электронных состояний в напряженных слоях Si вблизи гетерограницы с Ge. Деформация кристалла, возникающая из-за рассогласования параметров решетки Ge и Si, приводит к расщеплению Δ -минимумов зоны проводимости Si, в результате которого низшими минимумами в деформированном Si оказываются две из шести Δ -долин, расположенные вдоль направлений [001] в зоне Бриллюэна. Поскольку напряжения в Si спадают по мере удаления от слоя Ge, то в Si вблизи вершины и дна германиевых нанокластеров возникают трехмерные треугольные потенциальные ямы для электронов. Было показано, что контроль за упругими деформациями в многослойных гетероструктурах Ge/Si с вертикально совмещенными нанокластерами Ge позволяет сформировать связан-

ные электронные состояния с энергией связи электрона, достигающей величины 100 мэВ [112]. В данной главе проводятся результаты теоретических исследований экситонных состояний в спаренных квантовых точках, образованных вертикально сопряженными нанокластерами Ge в Si.

Двойная квантовая точка моделировалась двумя одинаковыми нанокластерами Ge, расположенных один над другим в направлении роста структуры [001] (ось z) в матрице Si и разделенных слоем Si толщиной d (рис. 4.2). Величина d варьировалась в вычислительном эксперименте от 2 нм до 9 нм. Нанокластеры Ge имели форму пирамид с ориентацией основания вдоль направлений [100] (ось x) и [010] (ось y) и боковыми гранями, ограниченными плоскостями $\{105\}$. Последнее обстоятельство означает, что отношение высоты h к латеральному размеру l в нанокластерах не зависит от размера и составляет ≈ 0.1 . Расчеты проводились для квантовых точек с латеральными размерами 10, 15 и 20 нм. Каждая пирамида располагалась на тонком сплошном (смачивающем) слое Ge толщиной 4 монослоя (один монослой равен 1.41 \AA). Выбранные форма островков Ge и их размеры соответствуют реальной экспериментальной ситуации [113]. Область кристалла, вовлеченная в вычислительный процесс, имела форму прямоугольного параллелепипеда и типичные размеры $17.5 \times 17.5 \times 25 \text{ нм}^3$ вдоль направлений x , y и z , соответственно. Для того чтобы убедиться в правильном выборе размеров этой области, были проведены контрольные вычисления для нескольких размеров. Установлено, что при изменении вертикального размера “ящика” от 17.5 нм до 25 нм энергии связи дырки остается неизменной с точностью лучше 1 мэВ.

На первом этапе находилось трехмерное пространственное распределение упругих деформаций в среде с помощью метода конечных элементов, описанном в главе 2. При этом все пространство разбивалось на конечные объемы в форме тетраэдров. Распределение механи-

ческих напряжений получается путем минимизации упругой энергии системы как функции смещений всех вершин тетраэдров. В дальнейшем, полученные таким образом компоненты тензора деформаций $\varepsilon_{\alpha\beta}$ использовались в качестве входных параметров при расчетах зонной структуры.

Процедура расчета энергий и волновых функций дырок была выполнена с помощью 6-ти зонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -метода, в который были включены три ветви валентной зоны: подзоны тяжелых и легких дырок, а также подзона, отщепленная спин-орбитальным взаимодействием. Тяжелые дырки характеризуются проекцией полного магнитного момента $J_z = \pm 3/2$ на вертикальную ось симметрии, а легкие дырки и дырки в спин-отщепленной подзонах - значениями $J_z = \pm 1/2$. Детальный вид всех составляющих гамильтониана для дырок приведен в главе 2. Поскольку для КТ Ge/Si с размером $l \sim 10$ нм энергия связи дырок много больше энергии кулоновского взаимодействия с электроном [2], можно пренебречь влиянием кулоновского взаимодействия с электроном на дырочный спектр.

Потенциал для электрона определяется: (1) разрывом зон проводимости на гетерогранице Ge/Si, (2) неоднородным распределением упругих деформаций, которое приводит к появлению потенциальной ямы в Si вблизи вершины и дна нанокластера Ge [112], и (3) кулоновским притяжением к дырке. Последний вклад может доминировать [2], поэтому при расчетах электронных состояний кулоновское взаимодействие с дыркой учитывать необходимо. В присутствии деформаций потенциальная энергия электрона в Δ_2 -точке зоны проводимости напряженной гетероструктуры может быть записана в виде выражения 2.6 [78].

Огибающие волновые функции электрона $\psi_e(\mathbf{r}_e)$ находились на основе численного решения трехмерного уравнения Шредингера в однозонном приближении эффективной массы со связывающим потенциа-

лом $U(\mathbf{r}_e) = U_e(\mathbf{r}_e) + V_{eh}(\mathbf{r}_e)$, где

$$V_{eh}(\mathbf{r}_e) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{|\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2 d\mathbf{r}_h}{\epsilon|\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e|}, \quad (5.1)$$

описывает электрон-дырочное взаимодействие, $\psi_h(\mathbf{r}_h)$ -волновая функция дырки в $\Gamma_{25'}$ -точке зоны Бриллюэна, $\epsilon_0 = 8.87 \times 10^{-12}$ Ф/м - диэлектрическая проницаемость вакуума, ϵ - диэлектрическая проницаемость материала, равная полусумме диэлектрических проницаемостей Si и Ge, $\mathbf{r}_{e(h)}$ указывает положение электрона (дырки). Значения продольной и поперечной массы электрона в Δ -долинах Si выбирались как $m_{xy} = 0.19m_0$ и $m_z = 0.92m_0$, где m_0 -масса свободного электрона.

В дипольном приближении сила осциллятора для перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости пропорциональна величине [114]

$$R = |\langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{p} | i \rangle|^2, \quad (5.2)$$

где $|f\rangle$ и $|i\rangle$ представляют конечное и начальное состояния, \mathbf{e} - вектор поляризации света, \mathbf{p} -оператор импульса. Волновая функция электрона в точке Δ_1 зоны проводимости имеет вид $|f\rangle = \psi_e(\mathbf{r}_e)u_c(\mathbf{r}_e)$, где $\psi_e(\mathbf{r}_e)$ -огibaющая волновая функция, $u_c(\mathbf{r}_e)$ -блоховская функция. Соответственно, в валентной зоне $|i\rangle = \psi_h(\mathbf{r}_h)u_v(\mathbf{r}_h)$, где $u_v(\mathbf{r}_h)$ -блоховская функция вблизи потолка зоны $\Gamma_{25'}$. Так как периодические функции u_c и u_v очень быстро осциллируют на характерной длине изменения огибающих ψ_e и ψ_h , то сила осциллятора определяется, главным образом, величиной интеграла перекрытия в квадрате $M^2 = \langle \psi_e | \psi_h \rangle^2$ [115] и $R \sim \|p\|^2 \langle \psi_e | \psi_h \rangle^2$, где $\|p\|$ -численное значение модуля матричного элемента дипольного момента, взятого на блоховских амплитудах зоны проводимости и валентной зоны Ge и Si. С учетом того, что огибающая волновая функция дырки является многокомпонентной, окончательное выражение для силы осциллятора имеет следующий вид

$$R = A \sum_{J_z} \langle \psi_e | \phi_{J_z} \rangle^2, \quad (5.3)$$

где A -некое число, определяемое микроскопической структурой Ge и Si. Сумма в выражении (5.3) включает 6 компонент волновой функции дырки ϕ_{J_z} , отвечающих подзонам тяжелых дырок, легких и спин-отщепленной подзоне с разными полным магнитным моментом J и его проекциями J_z на вертикальную ось симметрии. Здесь $J_z = \pm 3/2, \pm 1/2$ для мультиплета $J = 3/2$ (тяжелые и легкие дырки), и $J_z \pm 1/2$ для спин-отщепленной подзоны ($J = 1/2$).

5.2 Пространственная структура экситонов

Расчеты проводились для первых двух состояний дырок и электронов (e_0 и e_1). Анализировались четыре экситонных перехода с наименьшей энергией: $e_0 - \sigma_g$, $e_1 - \sigma_g$, $e_0 - \sigma_u$ и $e_1 - \sigma_u$. Здесь e_0 и e_1 - основное и возбужденное состояния электрона, соответственно; σ_g и σ_u отвечают симметричной (связывающей) и антисимметричной (антисвязывающей) молекулярным орбиталам дырок. На рис.5.2 показаны энергии экситонных переходов и относительная величина интенсивности этих переходов для одиночных и двойных квантовых точек различного размера l и при различных расстояниях d между спаренными КТ. Интенсивность переходов находилась с помощью соотношения

$$I(E) = \sum_i R_i S(E - E_i)/R_0, \quad (5.4)$$

где R_i -сила осциллятора для i -го экситонного перехода в двойной квантовой точке, R_0 -сила осциллятора для основного состояния экситона в одиночной КТ, $S(E - E_i)$ -функция Лоренца с параметром уширения $\Gamma = 1$ мэВ. Величины R_i и R_0 находятся по формуле (5.3).

Для одиночных квантовых точек основное состояние экситона соответствует конфигурации, когда дырка находится в основном состоянии h_0 в Ge, а электрон связан в Si вблизи вершины пирамиды Ge (состояние e_0 на рис.5.1). Величины перекрытия волновых функций

электрона и дырки и энергия кулоновского взаимодействия электрона и дырки для такого экситона составили 25.4% и 28.8 мэВ для 10 нм, 18.2% и 27.5 мэВ для 15 нм, 14.1% и 24.4 мэВ для 20 нм. Интенсивность перехода $e_0 - h_0$ была принята за 1 на рис. 5.2. Вероятность перехода $e_1 - h_0$ несколько меньше, чем для $e_0 - h_0$ (рис.5.2) из-за большего пространственного разделения электрона и дырки и разной пространственной симметрии состояний h_0 и e_1 (рис.5.1).

Известно, что в двойных квантовых точках 1-го типа (например, InAs/GaAs) лишь два экситона, для которых состояния электрона и дырки имеют одинаковую пространственную симметрию, из четырех возможных конфигураций являются оптически активными [98]. На рис.5.2 видно, что в нашем случае все четыре экситонных состояния за редким исключением имеют отличную от нуля силу осциллятора. Это связано с тем, что в КТ Ge/Si электронные состояния локализованы в слоях Si и не образуют в отличие от дырок симметричных и антисимметричных орбиталей молекулярного типа (рис.5.3).

На рис.5.2 видно, что при $d < 4 - 5$ нм основное состояние экситона соответствует конфигурации $e_0 - \sigma_g$, и при удалении КТ друг от друга сменяется конфигурацией $e_0 - \sigma_u$. Это объясняется изменением пространственной симметрии основного состояния дырок при увеличении расстояния между КТ в результате индуцированного деформацией сдвигов подзон тяжелых, легких и спин-отщепленных дырок [116].

Наиболее интересным результатом, отображенным на рис.5.2, является увеличение интенсивности перехода $e_0 - \sigma_g$ в случае, когда расстояние между квантовыми точками составляет $d = 3.0 - 3.5$ нм. Так для 15 нм и $d = 3.0$ нм вероятность экситонного перехода в двойной квантовой точке в 5 раз превышает вероятность такого перехода в одиночной. Наблюдаемую на рис.5.2 эволюцию силы осциллятора при изменении расстояния между КТ d можно объяснить, рассмотрев характерные примеры пространственной конфигурации волновых функций

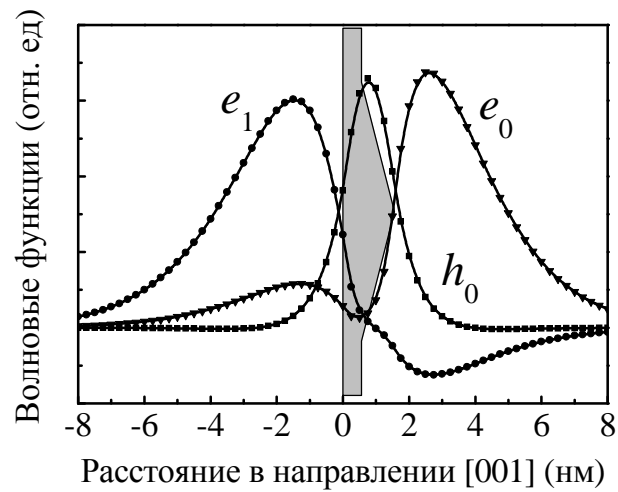


Рис. 5.1. Профили волновых функций электрона (e_0 , e_1) и дырки (h_0) в составе экситонов $e_0 - h_0$ и $e_1 - h_0$ в одиночной квантовой точке с $l = 10$ нм. В качестве h_0 приведена компонента $J_z = -3/2$. Как и на рис.1 окрашенной в серый цвет областью показано расположение слоя Ge, содержащего пирамиду Ge на сплошном слое Ge

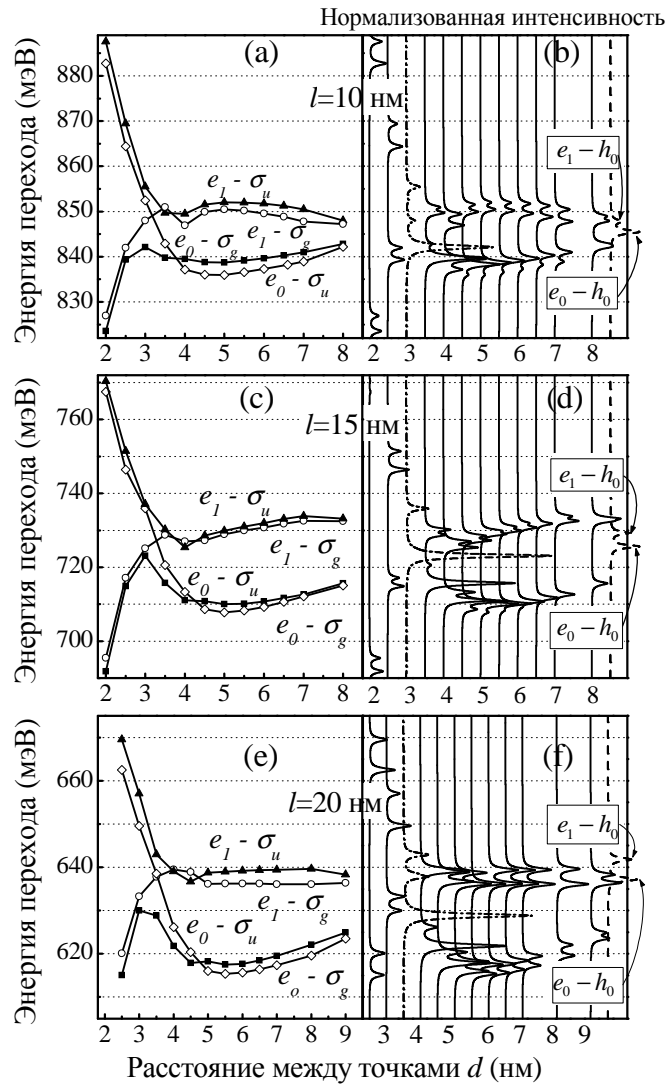


Рис. 5.2. Энергетические уровни первых четырех экситонных состояний в двойных квантовых точках (а), (с), (е) и соответствующие им оптические резонансы (b), (d), (f) как функция расстояния между квантовыми точками d . Для сравнения показаны экситонные спектры, содержащие переходы $e_0 - h_0$ и $e_1 - h_0$, для одиночных квантовых точек (крайние правые кривые на панелях (b), (d) и (f)). Данные приведены для длины основания пирамид Ge $l = 10$ нм (а), (b); $l = 15$ нм (с), (d); $l = 20$ нм (е), (f). Интенсивности всех резонансов нормированы на интенсивность перехода $e_0 - h_0$ в одиночной КТ аналогичного размера

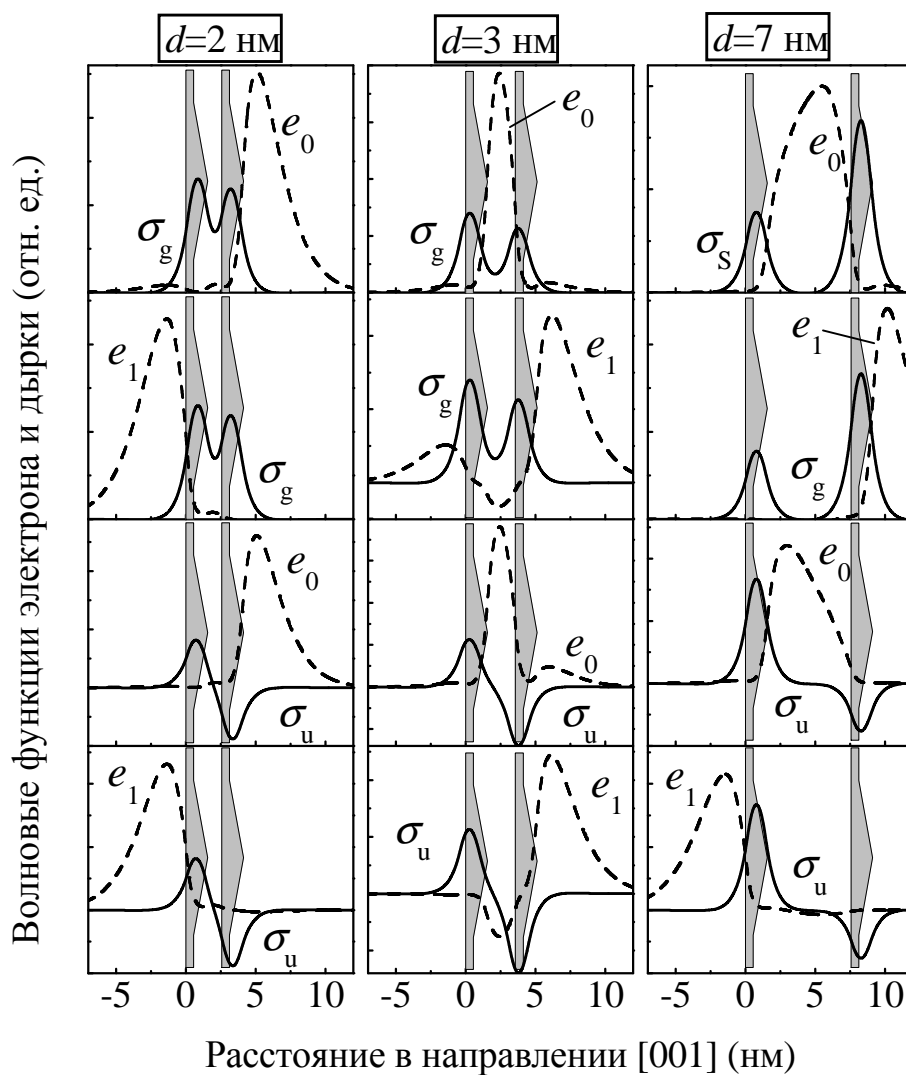


Рис. 5.3. Пространственная конфигурация экситонных состояний в двойных квантовых точках ($l = 10$ нм) вдоль оси z (направление $[001]$), проходящей через вершину пирамиды Ge. Здесь e_0, e_1 -электронные волновые функции, для дырочных орбиталей σ_g и σ_u приведена компонента $J_z = -3/2$

(рис.5.3). При малых d ($d < 3$ нм) электронная конфигурация аналогична случаю одиночной квантовой точки: электрон локализован либо вблизи вершины верхней КТ, либо под нижней квантовой точкой. Это означает, что пара квантовых точек представляется для электрона как одна, но более высокая точка. По этой причине перекрытие волновых функций электрона и дырки, а значит и R , при малых d мало.

По мере увеличения d электронные состояния возникают уже между КТ. И если вероятность найти дырку между КТ отлична от нуля, то перекрытие волновых функций электрона и дырки может стать существенным. Оказалось, что максимальное перекрытие реализуется для симметричной конфигурации $e_0 - \sigma_g$ и $d = 3.0 - 3.5$ нм (для примера на рис.5.3 показаны волновые функции для $l = 10$ нм).

На больших расстояниях квантовые точки ведут себя практически как изолированные, за тем исключением, что асимметрия распределения деформации приводит к асимметрии волновой функции дырки. В этом случае, поскольку расстояние между электроном и дыркой увеличивается, сила осциллятора опять начинает уменьшаться (пример $d = 7$ нм на рис.5.3). Наконец, в пределе $d \rightarrow \infty$ интенсивность экситонных переходов в двойной КТ должна стремиться к удвоенной силе осциллятора одиночной КТ. Однако эта ситуация не рассматривается в работе из-за ограниченности вычислительных ресурсов.

Выводы к главе 5

Основные результаты главы 5 можно сформулировать следующим образом:

Теоретически проанализированы экситонные переходы в двойных вертикально - совмещенных квантовых точках Ge/Si. Латеральные размеры квантовых точек варьировались от 10 до 20 нм, высота от 1 до 2 нм.

Обнаружено, что при малых расстояниях между квантовыми точками, основным состоянием экситона в двойных, вертикально совмещенных квантовых точках, является экситон, сформированный дыркой в связывающем состоянии и электроном в основном состоянии. При увеличении расстояния между квантовыми точками, основным состоянием экситона является экситон, сформированный дыркой в антисвязывающем состоянии и электроном в основном состоянии.

Обнаружено, что при расстояниях между квантовыми точками 3.0–3.5 нм сила осциллятора для межзонного перехода с формированием основного состояния экситона может многократно превышать аналогичную величину в одиночной квантовой точке. В такой ситуации существенная часть электрона и дырки находится в одной и той же области пространства, обеспечивая таким образом возможность прямых переходов в реальном пространстве.

Выводы

Основные результаты работы состоят в следующем:

- В модели поля валентных сил с использованием межатомного потенциала Китинга рассчитаны механические напряжения в многослойной гетероструктуре Ge/Si(001) с четырьмя вертикально совмещенными нанокластерами (квантовыми точками) Ge. Обнаружено, что неоднородное пространственное распределение упругих деформаций в такой среде приводит к появлению в напряженных слоях Si вблизи нанокластеров Ge трехмерной потенциальной ямы для электронов. Найдены энергии связи и пространственное распределение плотности электронного заряда. Энергия связи электрона в основном состоянии растет от 60 мэВ до 90 мэВ при изменении элементного содержания Ge в нанокластерах от 70% до 100%.
- Экспериментально исследован отклик комплексной проводимости кремниевых диодов Шоттки n-типа со встроенными в базовую область слоями квантовых точек Ge на внешнее переменное электрическое поле. В гетероструктурах, содержащих четыре слоя нанокластеров Ge, обнаружены максимумы температурной зависимости проводимости, обусловленные эмиссией электронов из состояний, связанных в отщепленных деформацией Дельта-долинах Si, в делокализованные состояния зоны проводимости ненапряженного Si. Определена энергия связи электронов, равная 50 мэВ и 70 мэВ для содержания Ge в нанокластерах 70% и 80%, соответственно.
- В приближении сплошной среды определены упругие деформации в структурах, состоящих из двух вертикально совмещенных квантовых точек Ge, имеющих форму пирамид, в матрице Si.

Показано, что при уменьшении расстояния между квантовыми точками происходит релаксация механических напряжений внутри обоих нанокластеров Ge по сравнению со случаем одиночной квантовой точки. Установлено, что при сближении квантовых точек пространственное распределение упругих деформаций становится асимметричным. В результате, определяющая энергетическую структуру валентной зоны одноосная деформация внутри верхнего нанокластера становится меньше, чем в нижнем.

- В рамках шести зонного кр-метода с гамильтонианом Бира-Пикуса проведен расчет энергетического спектра дырочных орбиталей в структуре с двумя вертикально совмещенными квантовыми точками Ge/Si. Установлено, что при увеличении расстояния между квантовыми точками Ge происходит пересечение энергетических уровней, соответствующих одночастичным орбиталям различной симметрии. В результате, при большой дистанции между нанокластерами Ge основным состоянием становится антисвязывающая дырочная орбиталь.
- В рамках метода конфигурационного взаимодействия, адаптированного для многокомпонентных дырочных состояний, проведен расчет энергетического спектра и волновых функций двух дырок в структуре состоящей из двух вертикально связанных квантовых точек Ge. Обнаружено, что при сближении квантовых точек обменная энергия двухчастичных состояний имеет минимум в точке пересечения уровней связывающего и антисвязывающего состояния. Показано, что состояния синглета и триплета в этой точке вырождаются. Показано, что причиной смены симметрии основного одночастичного состояния и вырождения двухчастичных состояний является неоднородное распределение упругих деформаций.

- Для низшего по энергии спинового синглета обнаружено явление, связанное с кулоновскими корреляциями в движении двух дырок и проявляющееся в локализации двухчастичной волновой функции дырок в противоположных квантовых точках при удалении точек друг от друга. Показано, что степень перепутывания квантовых состояний синглета в условиях проявления таких пространственных корреляций достигает 100%.
- Обнаружено, что в двойных квантовых точках Ge/Si существуют условия (размеры квантовых точек и расстояние между ними), при которых сила осциллятора межзонных переходов увеличивается до 5 раз по сравнению со случаем одиночной квантовой точки. При этом существенная часть волновой функции электрона и дырки располагается в одной и той же области пространства, обеспечивая тем самым возможность экситонных переходов, прямых в реальном пространстве.

Публикации по теме диссертации

- 1) А. И. Якимов, А. В. Двуреченский, А. А. Блошкин, А. В. Ненашев. *Связывание электронных состояний в многослойных напряженных гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками 2-го типа*. – Письма в ЖЭТФ, 2006, т. 83, вып. 4, 189-194.
- 2) A. I. Yakimov, A. V. Dvurechenskii, A. I. Nikiforov, A. A. Bloshkin, A. V. Nenashev, V. A. Volodin. *Electronic states in Ge/Si quantum dots with type-II band alignment initiated by space-charge spectroscopy*. – Phys. Rev. B, 2006, v. 73, № 11, 115333.
- 3) A. I. Yakimov, A. I. Nikiforov, A. V. Dvurechenskii, A. A. Bloshkin. *Localization of electrons in type-II Ge/Si quantum dots stacked in multilayer structure*. – Phys. Stat. Solidi (c), 2007, v. 4, № 2, p. 442–444.
- 4) A. I. Yakimov, A. A. Bloshkin, A. V. Dvurechenskii. *Enhanced oscillator strength of interband transitions in coupled Ge/Si quantum dots*. – Appl. Phys. Lett., 2008, v. 93, 132105.
- 5) A. I. Yakimov, A. A. Bloshkin, A. V. Dvurechenskii. *Asymmetry of single-particle hole states in a strained Ge/Si double quantum dot*. – Phys. Rev. B, 2008, v. 78, 165310.
- 6) A. I. Yakimov, A. A. Bloshkin, A. I. Nikiforov, and A. V. Dvurechenskii. *Hole states in vertically coupled double Ge/Si quantum dots*. – Microelectronics Journal, 2009, v. 40, p. 785-787.
- 7) A. I. Yakimov, A. A. Bloshkin and A. V. Dvurechenskii. *Bonding-antibonding ground state transition in coupled Ge/Si quantum dots*. – Semicond. Sci. Tech., 2009, v. 34, 095002.
- 8) А. И. Якимов, А. А. Блошкин, А. В. Двуреченский. *Экситоны в двойных квантовых точках Ge/Si*. – Письма в ЖЭТФ, 2009, т. 90, №8, с 621-625.
- 9) A. I. Yakimov, A. A. Bloshkin, A. V. Dvurechenskii. *Calculating of energy spectrum and electronic structure of two holes in a pair of coupled Ge/Si quantum dots*. – Phys. Rev. B, 2010, v. 81, 115434.

10) A. I. Yakimov, A. A. Bloshkin, A. V. Dvurechenskii. *Double occupation probability and entanglement of two holes in double Ge/Si quantum dots.*

– Письма в ЖЭТФ, 2010, т. 92, №1, с. 37-40.

Литература

- [1] V. Ya. Aleshkin and N. A. Bekin. *The conduction band and selection rules for interband optical transitions in strained $Ge_{1-x}Si_x/Ge$ and $Ge_{1-x}Si_x/Si$ heterostructures.* – J. Phys.: Condens. Matter, 1997, v. 9, № 23, p. 4841–4852.
- [2] A. I. Yakimov, N. P. Stepina, A. V. Dvurechenskii, A. I. Nikiforov, A. V. Nenashev. *Excitons in charged Ge/Si type-II quantum dots.* – Semicond. Sci. Technol., 2000, v. 15, p. 1125–1130.
- [3] T. Meyer, M. Klemenc, H. von Känel. *Surface electronic structure modification due to buried quantum dots.* – Phys. Rev. B, 1999, v. 60, № 12, p. R8493–R8496.
- [4] А. В. Ненашев, А. В. Двуреченский. *Пространственное распределение упругих деформаций в структурах Ge/Si с квантовыми точками.* – ЖЭТФ, 2000, т. 118, № 3, с. 570–578.
- [5] А. И. Якимов, А. В. Двуреченский, Н. П. Степина, А. И. Никифоров, А. В. Ненашев. *Эффекты электрон-электронного взаимодействия в оптических свойствах плотных массивов квантовых точек Ge/Si .* – ЖЭТФ, 2001, т. 119, вып. 3, с. 574–589.
- [6] D. Loss, D. P. DiVincenzo *Quantum computation with quantum dots.* – Phys. Rev. A, 1998, v. 57, p. 120–126.

- [7] A. Barenco, D. Deutsch, and A. Ekert. *Conditional Quantum Dynamics and Logic Gates*. – Phys. Rev. Lett., 1995, v. 74, p. 4083–4086.
- [8] P. Zanardi and F. Rossi. *Quantum Information in Semiconductors: Noiseless Encoding in a Quantum-Dot Array*. – Phys. Rev. Lett., 1998, v. 81, p. 4752–4755.
- [9] Xin-Qi Li and Y. Arakawa *Single qubit from two coupled quantum dots: An approach to semiconductor quantum computations*. – Phys. Rev. A, 2000, v. 63, p. 012302.
- [10] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom *Resonant Spin Amplification in n-Type GaAs*. – Phys. Rev. Lett., 1998, v. 80, p. 4313–4316.
- [11] J. A. Gupta, D. D. Awschalom, X. Peng, and A. P. Alivisatos *Spin coherence in semiconductor quantum dots*. – Phys. Rev. B, 1998, v. 59, p. R10421–R10424.
- [12] R. Dingle, W. Weigman, C. H. Henry. *Quantum States of Confined Carriers in Very Thin $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs- $Al_xGa_{1-x}As$ Heterostructures*. – Phys. Rev. Lett., 1974, v. 33, № 14, p. 827–830.
- [13] P. M. Petroff, A. C. Gossard, R. A. Logan, W. Wiegmann. *Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties*. – Appl. Phys. Lett., 1982, v. 41, № 7, p. 635–638.
- [14] M. A. Reed, R. T. Bate, K. Bradshaw, W. M. Duncan, W. M. Frensley, J. W. Lee, H. D. Smith. *Spatial quantization in GaAs-AlGaAs multiple quantum dots*. – J. Vacuum Sci Technol. B, 1986, v. 4, p. 358.
- [15] J. Cibert, P. M. Petroff, G. J. Dolan, S. J. Pearton, A. C. Gossard, J. H. English. *Optically detected carrier confinement to one and zero*

- dimension in GaAs quantum well wires and boxes.* – Appl. Phys. Lett., 1986, v. 49, № 19, p. 1275–1277.
- [16] H. Temkin, G. J. Dolan, M. B. Panish, S. N. G. Chu. *Low-temperature photoluminescence from InGaAs/InP quantum wires and boxes.* – Appl. Phys. Lett., 1987, v. 50, № 76 p. 413–415.
- [17] K. Kash, A. Scherer, J. M. Worlock, H. G. Craighead, M. C. Tamarco. *Optical spectroscopy of ultrasmall structures etched from quantum wells.* – Appl. Phys. Lett. 1986, v. 49, № 16, p. 1043–1045.
- [18] Y.-W. Mo, D. E. Savage, B. S. Swartzentruber, M. G. Lagally. *Kinetic pathway in Stranski-Krastanov growth of Ge on Si(001).* – Phys. Rev. Lett, 1990, v.64, № 16, p. 1943–1946.
- [19] G. Cappellini, L. G. Gaspare, F. Evangelisti. *Atomic-force microscopy study of self-organized Ge islands on Si(001) by low pressure chemical vapor deposition.* – Appl. Phys. Lett., 1997, v. 70, № 4, p. 493–495.
- [20] А. И. Якимов. *Электронные явления в массивах квантовых точек германия в кремнии.* – Дис. . . докт. физ.-мат. наук. – Новосибирск, 2001,– 302 с.
- [21] S. A Chararro, Y. Zhang, J. Druker, D. Chandrasekhar, D. J. Smith. *Evolution of Ge/Si(001) islands: island size and temperature dependence.* – J. Appl. Phys., 2000, v. 87, № 5, p. 2245–2254.
- [22] Л. Н. Александров, Р. Н. Ловягин. О. П. Пчеляков, С. И. Стенин. *Начальные стадии эпитаксии германия на кремнии при ионном распылении.* – В кн.: Рост и легирование полупроводниковых кристаллов и пленок, ч.2. Новосибирск: Наука, 1977, с. 139–149.
- [23] О. П. Пчеляков, Ю. Б. Болоховитянов, А. В. Двуреченский, Л. В. Соколов, А. И. Никифоров, А. И. Якимов, Б. Фойхлендер.

- Кремний-германиевые наноструктуры с квантовыми точками: механизмы образования и электрические свойства.* – ФТП, 2000, т. 34, вып. 11, с. 1281–1299.
- [24] А. В. Ненашев. *Моделирование электронной структуры квантовых точек Ge в Si.* – Дис. . . . канд. физ.-мат. наук. – Новосибирск, 2004,– 242 с.
- [25] A. I. Yakimov, V. A. Markov, A. V. Dvurechenskii and O. P. Pchelyakov. *'Coulomb staircase' in Ge/Si structure.* – *Phyl. Mag.*, 1992, v. 65, № 4, p. 701–705.
- [26] A. I. Yakimov, V. A. Markov, A. V. Dvurechenskii and O. P. Pchelyakov. *Conductance oscillations in Ge/Si heterostructures containing quantum dots.* – *J. Phys.: Condens. Matter*, 1994, v. 6, p. 2573–2582
- [27] A. I. Yakimov, C. J. Adkins, R. Boucher, A. V. Dvurechenskii, A. I. Nikiforov, O. P. Pchelyakov, G. Biskupski. *Hopping conduction and field effect in Si modulation-doped structures with embedded Ge quantum dots.* – *Phys. Rev. B*, 1999, v. 59, № 19, p. 12598–12603.
- [28] В. Я. Алешкин, Н. А. Бекин, М. Н. Буянова, Б. Н. Звонков, А. В. Мурель *Определение плотности состояний в квантовых ямах и ансамблях квантовых точек вольт-фарадным методом.* – *Физик и техника полупроводников*, 1999, т. 33, № 10, сс. 1246–1251.
- [29] S. K. Zhang, H. U. Zhu, F. Lu, Z. M. Jiang, and Xun Wang. *Coulomb Charging Effect in Self-Assembled Ge Quantum Dots Studied by Admittance Spectroscopy.* – *Phys. Rev. Lett*, 1998, v. 80, № 15, p. 3340–3343.

- [30] D. V. Lang. *Deep-level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors.* – J. Appl. Phys., 1974, v. 45, № 7. p. 3023–3032.
- [31] K. Dmowski, B. Lepley, E. Losson, M. El Bouabdellati. *A method to correct for leakage current effects in deep level transient spectroscopy measurement on Schottky diodes.* – J. Appl. Phys., 1993, v. 74, № 6, p. 3936–3943.
- [32] S. Tong, J. L. Liu, J. Wan, and Kang L. Wang. *Normal-incidence Ge quantum-dot photodetectors at 1.5 μm based on Si substrate.* – Appl. Phys. Lett., 2002, v. 80, № 7, p. 1189–1191.
- [33] M. Stoffel, U. Denker, and O. G. Schmidt. *Electroluminescence of self-assembled Ge hut clusters.* – Appl. Phys. Lett., 2003, v. 82, № 19, p. 3236–3238
- [34] N. D. Zakharov, V. G. Talalaev, P. Werner, A. A. Tonkikh, G. E. Cirilin. *Room-temperature light emission from a highly strained Si/Ge superlattice.* – Appl. Phys. Lett., 2003, v. 83, № 15, p. 3084–3086.
- [35] В. А. Егоров, Г. Э. Цырлин, А. А. Тонких, В. Г. Талалаев, А. Г. Макаров, Н. Н. Леденцов, В. М. Устинов, N. D. Zakharov, P. Werner. *Исследование оптических свойств структур со сверхплотными массивами квантовых точек Ge в матрице Si.* – ФТП, 2003, т. 37, вып. 2, с. 219–223.
- [36] Y. H. Peng, Chih-Hsuiung Hsu, C. H. Kuan, C. W. Liu, P. S. Chen, M.-J. Tsai, Y. W. Suen. *the evolution of electroluminescence in Ge quantum-dot diodes with the fold number.* – Appl. Phys. Lett., 2004, v. 85, № 25, p. 6107–6109.
- [37] M. Kolahdouz, A. Afshar Farniya, L. Di Benedetto, and H. H. Radamson. *Improvement of infrared detection using Ge*

- quantum dots multilayer structure.* – Appl. Phys. Lett., 2010, v. 96, p. 213516.
- [38] C. Miesner, K. Bruner, and G. Abstreiter. *Vertical and Lateral Mid-Infrared Photocurrent Study on Ge Quantum Dots in Si.* – Phys. Stat. Sol.(b), 2001, v. 224, № 2, p. 605–608.
- [39] R. K. Singha, S. Manna, S. Das, A. Dhar, and S. K. Ray. *room temperature infrared photoresponse of self assembled Ge/Si (001) quantum dots grown by molecular beam epitaxy.* – Appl. Phys. Lett., 2010, v. 96, p. 233113.
- [40] Л. Д. Ландау, Е. М. Лившиц. *Теория упругости.* – М.: Наука, 1987,– 246 с.
- [41] P. N. Keating. *Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure.* – Phys. Rev., 1966, v. 145, №2, p. 637–645.
- [42] M. A. Cusack, P. R. Briddon, M. Jaros. *Electronic structure of InAs/GaAs self-assembled quantum dots.* – Phys. Rev. B, 1996, v.54, № 8, p. R2300-R2303.
- [43] T. Saito, Y. Arakawa. *Electronic structure of piezoelectric In_{0.2}Ga_{0.8}N quantum dots in GaN calculated using a tight-binding method.* - Physica E, 2002, v. 15, pp. 169–181.
- [44] I. Daruka, A.-L. Barabasi, S. J. Zhou, T. C. Germann, P. S. Lom,dahl, A. R. Bishop. *molecular-dynamic investigation of the surface stress distribution in a Ge/Si quantum dot superlattice.* – Phys. Rev. B, 1999, v. 60, № 4, p. R2150–2153.
- [45] Y. Kikuchi, H. Sugii, K. Shintani. *Strain profiles in pyramidal quantum dots by means atomistic simulation.* – J. Appl. Phys., 2001, v. 89, № 2, p. 1191–1196.

- [46] O. Steir, M. Grundmann, D. Bimberg. *Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band $k.p$ theory.* – Phys. Rev. B, 1999, v. 59, № 8, p. 5688–5701.
- [47] C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang, A. J. Williamson, and A. Zunger. *Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots.* – J. Appl. Phys., 1998, v. 83, p. 2548–2554.
- [48] J. M. Luttenger, W. Kohn. *Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields.* – Phys. Rev., 1955, v. 97, № 4, p. 869–883.
- [49] M. Grundman, O. Steir, D. Bimberg. *InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure.* – Phys. Rev. B, 1995, v. 52, № 16, p. 11969–11981.
- [50] H. Jiang, J. Singh. *Strain distribution and electronic spectra of InAs/GaAs self-assembled dots: An eight-band study.* – Phys. Rev. B, 1997, v. 56, № 8, p. 4696–4701.
- [51] C. Pryor. *Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations.* – Phys. Rev. B, 1998, v. 57, № 12, p. 7190–7195.
- [52] Y. Zhang. *Motion of electrons in semiconductors under inhomogeneous strain with application to laterally confined quantum wells.* – Phys. Rev. B, 1994, v. 49, № 20, p. 14352–14366.
- [53] Б. Парлетт. *Симметричная проблема собственных значений.* – М.: Мир, 1983. – 384 с.
- [54] M. Califano, P. Harrison. *Presentation and experimental validation of a single-band, constant-potential model for self-assembled InAs/GaAs quantum dots.* – Phys. Rev. B, 2000, v. 61, № 16, p. 10959–10965.

- [55] J. H. Seok, J. Y. Kim. *Electronic structure and compositional interdiffusion in self-assembled Ge quantum dots on Si(001)*. - Appl. Phys. Lett., 2001, v. 78, № 20, p. 3124-3126.
- [56] J. Y. Kim, J. H. Seok. *Electronic structure of Ge/Si self-assembled quantum dots with different shapes*. - Materials Science and Engineering B, 2002, v. 89, p. 176-179.
- [57] Lin-Wang Wang, J. Kim, and A. Zunger. *Electronic structures of [110]-faceted self-assembled pyramidal InAs/GaAs quantum dots*. - Phys. Rev. B, v. 59, № 8, p. 5678-5687.
- [58] S. Y. Ren *Quantum confinement of edge states in Si crystallites*. - Phys. Rev. B, 1997, v. 55, № 7, p. 4665-4669.
- [59] Y. M. Niquet, C. Delerue, G. Allan, M. Lannoo. *Method for tight-binding parametrization: Application to silicon nanostructures*. - Phys. Rev. B, 2000, v. 62, № 8, p. 5109-5116.
- [60] L. -W. Wang, A. Zunger. *Solving Schrödinger's equation around a desired energy: Application to silicon quantum dots*. - J. Chem. Phys., 1994, v. 100, № 3, p. 2394-2397.
- [61] Y. M. Niquet, G. Allan, C. Delerue, M. Lannoo *Quantum confinement in germanium nanocrystals*. - Appl. Phys. Lett., 2000, v. 77, № 8, p. 1182-1184.
- [62] H. Fu, A. Zunger. *InP quantum dots: Electronic structure, surface effects, and the redshifted emission*. - Phys. Rev. B, 1997, v. 56, № 3, pp. 1496-1508.
- [63] J. Schrier, K. B. Whaley. *Tight-binding g-factor calculations of CdSe nanostructures*. - Phys. Rev. B, 2003, v. 67, p. 235301.
- [64] J. C. Slater, G. F. Koster. *Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem*. - Phys. Rev., 1954, v. 94, № 6, p. 1498-1524.

- [65] T. Saito, J. N. Schulman, Y. Arakawa. *Strain-energy distribution and electronic structure of InAs pyramidal quantum dots with uncovered surfaces: Tight-binding analysis*. - Phys. Rev. B, 1998, v. 57, № 20, p. 13016–13019.
- [66] R. Santoprete, B. Koiller, R. B. Capaz, P. Kratzer, Q. K. K. Liu, M. Scheffler. *Tight-binding study of the influence of the strain on the electronic properties of InAs/GaAs quantum dots*. - Phys. Rev. B, 2003, v. 68, p. 235311.
- [67] L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, S. Tarucha. *Few-electron quantum dots*. - Reports on Progress in Physics, 2001, v. 64, p. 701-736.
- [68] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wojs. *Quantum dots*. - Berlin: Springer-Verlag, 1998. - 176 p.
- [69] А. В. Чаплик. *Электронные свойства квантовых точек*. - Письма в ЖЭТФ, 1989, т. 50, № 1, с. 38–40.
- [70] T. Takagahara, K. Takeda. *Theory of quantum confinement effect on excitons in quantum dots of indirect-gap materials*. - Phys. Rev. B, 1992, v. 46, № 23, p. 15578–15781.
- [71] A. Wojs, P. Hawrylak. *Theory of photoluminescence from modulation-doped self-assembled quantum dots in a magnetic field*. - Phys. Rev. B, 1997, v. 55, № 19, pp. 13066–13071.
- [72] J. Harting, O. Mülken, P. Borrmann. *Interplay between shell effects and electron correlations in quantum dots*. - Phys. Rev. B, 2000, v. 62, № 15, p. 10207–10211.
- [73] M. Macucci, K. Hess, G. J. Iafrate. *Simulation of electronic properties and capacitance of quantum dots*. - J. Appl. Phys., 1995, v. 77, № 7, p. 3267–3276.

- [74] K. Hirose, N. S. Wingreen. *Spin-density-functional theory of circular and elliptical quantum dots*. - Phys. Rev. B, 1999, v. 59, № 7, p. 4604–4607.
- [75] L. He, G. Bester, A. Zunger *Electronic asymmetry in self-assembled quantum dot molecules made of identical InAs/GaAs quantum dots*. - Phys. Rev. B, 2005, v. 72, p. 081311(R).
- [76] L. He, G. Bester, A. Zunger *Singlet-triplet splitting, correlation, and entanglement of two electrons in quantum dot molecules*. - Phys. Rev. B, 2005, v. 72, p. 195307.
- [77] Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. *Симметрия и Деформационные эффекты в полупроводниках*. - М.: Наука, 1972 г., 584 с.
- [78] C. G. Van de Walle. *Band lineups and deformational potentials in model-solid theory*. - Phys. Rev. B, 1989, v. 39, p. 1871–1883.
- [79] T. Ando, H. Akera. *Connection of envelope functions at semiconductor heterointerfaces. II. Mixings of Γ and X valleys in GaAs/Al_xGa_{1-x}As*. - Phys. Rev. B, 1989, v. 40, p. 11619.
- [80] Y. Fu, M. Willander, E. L. Ivchenko, A. A. Kiselev. *Valley mixing in GaAs/AlAs multilayer structures in the effective-mass method*. - Phys. Rev. B, 1993, v. 47, p. 13498.
- [81] A. V. Nenashev, A. V. Dvurechenskii, and A. F. Zinovieva. *Wave functions and g factor of holes in Ge/Si quantum dots*. - Phys. Rev. B, 2003, v. 67, p. 205301.
- [82] D. Bimberg et al., in *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology* – Berlin, Springer-Verlag, 1982 edited by O. Madelung, Landolt-Burnstein, New Series, Group III, Vol. 17, Pt. A.

- [83] А. А. Самарский, А. В. Гулин. *Численные методы* – М.: Наука, 1989 г., 432 с.
- [84] A. A. Kiselev, U. Rössler. *Quantum wells with corrugated interfaces: Theory of electron states.* – Phys. Rev. B, 1994, v. 50, № 19, p. 14283–1286.
- [85] N. Marzari, D. Vanderbilt. *Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands.* – Phys. Rev. B, 1997, v. 56, № 20, p. 12847–12865.
- [86] W.-H. Chang, W. Y. Chen, M. C. Cheng, C. Y. Lai, T. M. Hsu, N.-T. Yeh, J.-I. Chyi. *Charging of embedded InAs self-assembled quantum dots by space-charge techniques.* – Phys. Rev. B, 2001, v. 64, № 12, p. 125315.
- [87] O. G. Schmidt, K. Eberl, Y. Rau. *Strain and band-edge alignment in single and multiple layers of self-assembled Ge/Si and GeSi/Si islands.* – Phys. Rev. B, v. 62, № 24, p. 16715–16720.
- [88] C. G. Van de Walle, R. M. Martin. *Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Ge/Si system.* – Phys. Rev. B, 1986, v. 34, № 8, p. 5621–5634.
- [89] L. Colombo, R. Resta, S. Baroni. *Valence band offset at strained Ge/Si interfaces.* – Phys. Rev. B, 1991, v. 44, № 11, p. 5572 – 5579.
- [90] G. P. Schwartz, M. S. Hybertsen, J. Bevk, R. G. Nuzzo, J. P. Mannaerts, G. J. Gualtieri. *Core-level photoemission measurements of valence-band offsets in highly strained heterojunctions: Ge-Si system.* – Phys. Rev. B, 1989, v. 39, p. 1235 – 1241.

- [91] J. F. Morar, P. E. Batson, J. Tersoff. *Heterojunction band lineups in Si-Ge alloys using spatially resolved electron-energy-loss spectroscopy*. – Phys. Rev. B, 1993, v. 47, № 7, p. 4107–4110.
- [92] J. Weber, M. I. Alonso. *Near-band-gap photoluminescence of Si-Ge alloys*. – Phys. Rev. B, 1989, v. 40, № 8, p. 5683–5693.
- [93] A. I. Yakimov, A. V. Dvurechenskii, A. V. Nenashev, A. I. Nikiforov. *Evidence for two-dimensional correlated hopping in arrays of Ge/Si quantum dots*. – Phys. Rev. B, 2003, v. 68, № 20, p. 205310.
- [94] D. V. Singh, R. Kim, T. O. Mitchell, J. L. Hoyt, J. F. Gibbons. *Admittance spectroscopy analysis of the conduction band offsets in Si/Si_{1-x-y}Ge_xC_y and Si/Si_{1-y}C_y heterostructures*. – J. Appl. Phys., 1998, v. 85, №2, p. 985–993.
- [95] П. Н. Брунков, С. Г. Конников, В. М. Устинов, А. Е. Жуков, А. Ю. Егоров, М. В. Максимов, Н. Н. Леденцов, П. С. Копьев. *Емкостная спектроскопия электронных уровней в квантовых точках InAs в матрице GaAs* – ФТП 1996, т. 30, с. 924–933.
- [96] P. N. Brunkov, A. Polimeni, S. T. Stoddart, M. Henini, L. Eaves, P. C. Main, A. R. Kovsh, Yu. G. Musikhin, S. G. Konnikov. *Electronic structure of self-assembled InAs quantum dots in GaAs matrix*. – Appl. Phys. Lett., 1998, v.73, № 8, p. 1092–1094.
- [97] A. I. Yakimov, G. Yu. Mikhalyov, A. V. Dvurechenskii, and A. I. Nikiforov. *Hole states in Ge/Si quantum-dot molecules produced by strain-driven self-assembly*. – J. Appl. Phys., 2007, v. 102, p. 093714.
- [98] J. I. Climente, M. Korkusinski, G. Goldoni and P. Hawrylak *Theory of valence-band holes as Luttinger spinors in vertically coupled quantum dots*. – Phys. Rev. B, 2008, v. 78, p. 115323

- [99] J. M. Luttinger *Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory.* – Phys. Rev., 1956, v. 102, p. 1030–1041.
- [100] D. V. Melnikov and J.-P. Leburton *Single-particle state mixing in two-electron double quantum dots.* – Phys. Rev. B., 2006, v. 73, p. 155301.
- [101] D. V. Melnikov, J.-P. Leburton, A. Taha, N. Sobh *Coulomb localization and exchange modulation in two-electron coupled quantum dots.* – Phys. Rev. B, 2006, v. 74, p. 041309(R)
- [102] D. Klauser, W. A. Coish, D. Loss *Nuclear spin state narrowing via gate-controlled Rabi oscillations in a double quantum dot.* – Phys. Rev. B, 2006, v. 73, p. 205302.
- [103] D. Heiss, S. Schaeck, H. Huebl, M. Bichler, G. Abstreiter, J. J. Finley, D. V. Bulaev, and D. Loss *Observation of extremely slow hole spin relaxation in self-assembled quantum dots.* – Phys. rev. B, 2007, v. 76, p. 241306.
- [104] C. Lü, J. L. Cheng, and M. W. Wu, *Hole spin relaxation in semiconductor quantum dots.* – Phys. Rev. B, 2005, v. 71, p. 075308.
- [105] D. V. Bulaev and D. Loss. *Electric Dipole Spin Resonance for Heavy Holes in Quantum Dots.* – Phys. Rev. Lett., 2007, v. 98, p. 097202.
- [106] K. V. Kavokin *Symmetry of anisotropic exchange interactions in semiconductor nanostructures.* – Phys. rev. B, 2004, v. 69, p. 075302.
- [107] M. Rontani, F. Troiani, U. Hohenester, and E. Molinary *Quantum phases in artificial molecules.* – Solid State Commun., 2001, v. 119, p. 309–321.

- [108] A. I. Yakimov, A. A. Bloshkin, A. V. Dvurechenskii *Asymmetry of single-particle hole states in a strained Ge/Si double quantum dot.* – Phys. Rev. B, 2008, v. 78, p. 165310.
- [109] A. I. Yakimov, G. Yu. Mikhalev, A. V. Dvurechenskii *Molecular ground hole state of vertically coupled GeSi/Si self-assembled quantum dots* – Nanotechnology, 2008, v. 19, p. 055202.
- [110] W. Jaskòlski, M. Zelinski, G. W. Bryant, and J. Aizpurua. *Strain effects on the electronic structure of strongly coupled self-assembled InAs/GaAs quantum dots: Tight-binding approach.* – Phys. Rev. B, 2006, v. 74, p. 195339.
- [111] W. Sheng and J.-P. Leburton *Anomalous Quantum-Confined Stark Effects in Stacked InAs/GaAs Self-Assembled Quantum Dots.* – Phys. Rev. Lett., 2002, v. 88, p. 167401.
- [112] 5. А. И. ЯКИМОВ, А. В. ДВУРЕЧЕНСКИЙ, А. А. БЛОШКИН, А. В. НЕНАШЕВ. *Связывание электронных состояний в многослойных напряженных гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками 2-го типа.* – Письма в ЖЭТФ, 2006, т. 83, вып. 4, с. 189–194.
- [113] A. I. Yakimov, A. I. Nikiforov, A. V. Dvurechenskii, V. V. Ulyanov, V. A. Volodin and R. Groetzschel. *Effect of the growth rate on the morphology and structural properties of hut-shaped Ge islands in Si(001)* – Nanotechnology, 2006, v.17, p. 4743–4747.
- [114] U. Bockelmann and G. Bastard. *Interband absorption in quantum wires. I. Zero-magnetic-field case.* – Phys. Rev. B, 1992, v. 45, №4, p. 1688–1699.
- [115] J. M. Rorison. *Excitons in type-II quantum-dot systems: A comparison of the GaAs/AlAs and InAs/GaSb systems.* – Phys. Rev. B, 1993, v. 48, p. 4643–4649.

- [116] A. I. Yakimov, A. A. Bloshkin, and A. V. Dvurechenskii. *Bonding–antibonding ground-state transition in coupled Ge/Si quantum dots.* – Semicond. Sci. Technol., 2009, v. 24, p. 095002.